

UNIVERSIDAD POLITÉCNICA DE MADRID

ESCUELA TÉCNICA SUPERIOR DE INGENIERÍA AGRONÓMICA,

ALIMENTARIA Y DE BIOSISTEMAS

ALGUNOS ASPECTOS DEL CAOS EN SISTEMAS DINÁMICOS CON MÁS DE 2 GRADOS DE LIBERTAD

Tesis Doctoral

Javier Montes Maldonado

Máster en Física Nuclear

2020



DEPARTAMENTO DE INGENIERÍA AGROFORESTAL

ESCUELA TÉCNICA SUPERIOR DE INGENIERÍA AGRONÓMICA,

ALIMENTARIA Y DE BIOSISTEMAS

ALGUNOS ASPECTOS DEL CAOS EN SISTEMAS DINÁMICOS CON MÁS DE 2 GRADOS DE LIBERTAD

Javier Montes Maldonado

Máster en Física Nuclear

DIRECTORES

Florentino Borondo Rodríguez

Doctor en Química Cuántica

Fabio Revuelta Peña

Doctor en Física de Sistemas Complejos

2020

Agradecimientos

Quiero expresar mi agradecimiento a todos los que han estado a mi lado en algún momento durante el desarrollo de esta Tesis. En particular a los que han tenido una influencia directa, por su ayuda, su estímulo y sobre todo su paciencia, Prof. Florentino Borondo Rodríguez y Prof. Fabio Revuelta Peña, así como a la Prof. Rosa María Benito Zafrilla, al Prof. Juan Carlos Losada y a todos los miembros del Grupo de Sistemas Complejos. Por último, agradecer también al Prof. Rigoberto Hernandez, que me ha dado la oportunidad de realizar una estancia de investigación en Baltimore, Estados Unidos, en la Universidad Johns Hopkins.

A mi hermana, por ser mi fuente de inteligencia emocional

A mi hermano, por inculcar en mi el pensamiento crítico

A mi madre, por ser mi fuente de amor incondicional

A mi padre, que con su esfuerzo me ha hecho un privilegiado durante toda mi vida

Ellos me hacen ser una persona completa.

Resumen/*Abstract*

En esta Tesis Doctoral se estudian dos sistemas físicos realistas con, al menos, dos grados de libertad. El primero es la gota caminante (del inglés *walking droplet*), que consiste en una gota milimétrica de líquido que rebota sobre la superficie vibrante del mismo fluido, deformándola y generando así un campo ondulatorio que la autopropulsa. El segundo es la dispersión elástica e inelástica de átomos por superficies metálicas corrugadas. Además se presenta un nuevo método basado en *descriptores lagrangianos* para la caracterización de los toros invariantes presentes en las regiones regulares de sistemas dinámicos, y se aplica este nuevo método, así como el original, al estudio del segundo de estos sistemas.

El trabajo realizado para cada uno de los sistemas estudiados es el siguiente:

–Gota caminante

En nuestro estudio, la gota caminante está sometida, además de al campo ondulatorio, a un potencial bidimensional cuártico (dinámica caótica). Hemos analizado el sistema de dos formas distintas: en la primera modelizando la fuerza que ejerce la superficie sobre la gota con una fricción de tipo Rayleigh y en la segunda haciéndolo mediante un término integral.

En lo que respecta a la primera se ha elucidado la estructura de los atractores que gobiernan la dinámica del sistema. Además, se han calculado las *funciones de densidad de probabilidad* asociadas a trayectorias deslocalizadas, que aparecen como distribuciones similares a las densidades de probabilidad cuánticas.

Respecto a la segunda, hemos demostrado que el modelo con el término integral presenta grandes analogías con la mecánica cuántica. Así, hemos construido un

esquema de cuantización, donde se puede distinguir un patrón nodal claro que aparece en función del efecto de memoria de los sucesivos saltos de la gota caminante, de forma análoga a lo que ocurre con la energía en un sistema cuántico. Por último, con el objetivo de entender mejor el origen de la cuantización en el sistema, hemos comprobado que cuando la longitud de onda es la adecuada, el sistema cumple una condición de cuantización análoga a la de Bohr-Sommerfeld, lo que nos ha permitido calcular una constante *hidrodinámica* que juega el mismo papel que tiene la constante de Planck en la mecánica cuántica.

–Dispersión elástica e inelástica de átomos por superficies metálicas corrugadas

Se ha llevado a cabo un estudio de las colisiones de átomos de helio con superficies corrugadas de cobre, descritas mediante un modelo realista, tanto en la zona de dispersión regular como en la caótica. En relación con la primera, en esta Tesis se ha desarrollado una transformación del *descriptor lagrangiano* que permite su aplicación al estudio de la parte regular en sistemas dinámicos genéricos. La eficacia de la nueva herramienta se ha verificado primero aplicándola al potencial de Hénon-Heiles, un sistema paradigmático dentro de los sistemas dinámicos, pasando luego al estudio de la función de dispersión elástica de átomos de helio por superficies corrugadas de cobre.

Por otra parte, también se ha aplicado el método de los *descriptores lagrangianos* en su versión original al estudio de la dinámica caótica en la dispersión inelástica, cuando los átomos impactan en superficies corrugadas *vibrantes*, debido a los fonones que existen a temperatura finita. Esto aumenta la dimensionalidad del sistema a 2.5 grados de libertad. La aplicación del método nos ha permitido distinguir las estructuras subyacentes en las regiones caóticas del espacio de fases, así como etiquetar y clasificar la dinámica del sistema a diferentes temperaturas (amplitudes de la vibración).

Por último, para tratar de entender como es la dinámica en estas estructuras, se ha construido una aproximación a las mismas en tres dimensiones, basada en el apilamiento de entramados homoclínicos a energía constante (dispersión elástica con dos grados de libertad) en la *superficies de sección de Poincaré*, lo que permite

conjeturar que si la temperatura de la superficie (perturbación) es pequeña, las trayectorias del átomo incidente en el caso inelástico de mayor dimensionalidad se moverán aproximadamente por la misma, ya que ésta será robusta, siendo solo distorsionada pero no destruida por la correspondiente perturbación.

In this Ph. D. Thesis we study two realistic physical systems with at least two degrees of freedom. The first one is the walking droplet, which consists of a millimetric drop of liquid bouncing off a vibrating surface of the same fluid, thus generating a wave deformation on it, which self-propels the droplet. The second one is the elastic and inelastic dispersion of atoms off metallic corrugated surfaces. We also present a new method based on Lagrangian descriptors for the characterization of the invariant tori that exist in the regular regions of generic dynamical systems.

The study conducted for each one of the studied systems is the following:

–Walking droplet

In our study, the walking droplet is subjected, together with the ondulatory field, to a bidimensional quartic oscillator potential (chaotic dynamics). We have analyzed the system in two ways. First, by modeling the force that the surface exerts on the droplet with a Rayleigh-like friction term, and second doing so by means of an integral term. For the Rayleigh model, the structure of the attractors that govern the dynamics has been elucidated. Moreover, the probability density functions associated with delocalized trajectories have been computed, which render distributions with a shape similar to quantum probability densities.

On the other hand, we have demonstrated that the integral model exhibits great analogies with the quantum case. Accordingly, we have constructed a quantization scheme, where a clear nodal pattern emerges at given values of the jumping memory factor, similar to what happens in quantum mechanics as a function of the energy. Finally, in order to obtain a better understanding of the origin of this quantization effect, we have verified that for certain values of the undulatory field wavelength, our quantization scheme is similar to the well-known Bohr-Sommerfeld semiclassical quantization condition. This allows to define a 'hydrodynamical' constant that plays a role similar to that played by the Planck's constant in quantum mechanics, thus given support to our interpretation.

–Elastic and inelastic scattering of atoms by metallic corrugated surfaces

Using a realistic model to describe the collisions of helium atoms off corrugated copper surfaces, we have studied both the regular and chaotic dispersion in this system. Regarding the first part (regular), we have developed in this Ph. D. Thesis

a modification of the Lagrangian descriptor method, able to characterized the regular dynamics of generic dynamical systems. We have first checked the performance of this new tool by applying it to the well known Hénon-Heiles Hamiltonian, a paradigmatic system in the field of nonlinear dynamics. The method is then applied to the study of the elastic dispersion function of helium atoms off corrugated copper surfaces.

In addition, the usual Lagrangian descriptors have been applied to unveil the structure of the chaotic regions of phase space when the dispersion of the atoms takes place in an inelastic fashion and the surface is subjected to the vibration produced by the phonons at finite temperature. This increases the dimensionality of the system to 2.5 degrees of freedom. Our approach has enabled the identification of the underlying phase space structures, as well as its labeling and the classification of the different trajectories of the system. In order to understand the dynamics inside the structures mentioned above, we have constructed a three-dimensional manifold consisting of a stack of the homoclinic tangles at constant energy (elastic scattering) existing in the Poincaré surfaces of section. The idea is that this structure will be robust, not being destroyed but only distorted by the perturbation associated with the increased dimensionality in the inelastic case. The corresponding higher dimensional trajectories will move, accordingly, very close to this geometrical structure.

Contenidos

Agradecimientos i

Resumen/*Abstract* iii

Lista de tablas xii

Lista de figuras xiii

1 Introducción 1

I Teoría 7

2 Mecánica hamiltoniana, caos y cuantización 9

2.1 El formalismo de Hamilton 10

2.1.1 Ecuaciones del movimiento 11

2.1.2 Transformaciones canónicas 12

2.2 Sistemas integrables y no integrables 14

2.2.1 Sistemas integrables 14

2.2.2 Sistemas no integrables 15

2.2.3 Números irracionales y fracciones continuadas 17

2.3 Notación simpléctica 19

2.4 Dinámica linealizada 20

2.4.1 Caracterización de órbitas periódicas 21

2.5 Indicadores de caos . . . 25
2.6 Descriptores lagrangianos . . . 30
2.7 Condición de cuantización semiclásica de Bohr-Sommerfeld . . . 35

3 Gotas caminantes **39**
3.1 Estados de vibración de las gotas caminantes . . . 42
3.2 Dinámica vertical . . . 44
3.3 Dinámica horizontal . . . 46
3.4 Modelos de onda piloto . . . 48
3.5 Condiciones de contorno . . . 54
3.6 Marco general del sistema onda piloto . . . 56
3.7 Modelo de baja memoria . . . 58

4 Dispersión elástica del sistema de colisión He-Cu **63**
4.1 Descripción del sistema . . . 64
4.1.1 Modelo de dispersión átomo-superficie con dos grados de libertad 64
4.1.2 Descripción de una superficie corrugada de cobre y potenciales asociados . . . 68
4.2 Análisis de la función de dispersión . . . 71
4.3 Dispersión caótica y la estructura del espacio de fases . . . 78

II Resultados **85**

5 Localización y cuantización en GCs **87**
5.1 Potencial externo . . . 87
5.2 Localización dinámica . . . 90
5.2.1 Trayectorias . . . 90
5.2.2 Superficie de sección de Poincaré . . . 96
5.2.3 Atractores . . . 98
5.2.4 Función de densidad de probabilidad . . . 98
5.3 Cuantización y gotas caminantes . . . 101

5.3.1 Ecuación de trayectoria para alta memoria 101
5.3.2 Independencia de las condiciones iniciales y dinámica de las ondas 103
5.3.3 Onda instantánea *versus* onda promedio 105
5.3.4 Cuantización de la onda promedio 108
5.4 Constante de cuantización 112
5.4.1 Longitud de onda 112
5.4.2 Trayectorias 113
5.4.3 Onda promedio 115
5.4.4 Condición de cuantización de Bohr-Sommerfeld 117

6 Caracterización de toros invariantes mediante descriptores lagrangianos 123
6.1 El hamiltoniano de Hénon-Heiles 124
6.2 Comportamiento de los descriptores lagrangianos en función del valor del intervalo de integración 127
6.3 Comportamiento del descriptor lagrangiano normalizado. Oscilador lagrangiano asociado 128
6.4 Aplicación del oscilador lagrangiano para el estudio de toros invariantes 133

7 Dispersión de átomos por una superficie corrugada 141
7.1 Aplicación de los descriptores lagrangianos a las dispersiones elásticas 142
7.2 Modelo para la dispersión inelástica de átomos de helio por una superficie de cobre en vibración 146
7.3 Estructura de la función de dispersión inelástica de átomos de helio por una superficie vibrante de cobre 150
7.4 Análisis de trayectorias inelásticas 158
7.5 Caracterización de la parte regular del sistema usando descriptores lagrangianos 164

8 Conclusiones/*Conclusions* 173

Bibliografía **180**

Lista de tablas

3.1 Lista de constantes y variables que aparecen en los diferentes modelos del sistema de gotas caminantes. 61
3.2 Resumen de los diferentes modelos del sistema de gotas caminantes ordenados por año de publicación. 62

4.1 Coeficientes de corrugación en el potencial asociado a la superficie para cada orientación cristalográfica del cristal de cobre 70
4.2 Parámetros de red y del potencial de Morse asociado a la superficie de cobre 70

6.1 Asignación de frecuencias de las señales en la figura 6.5. 135
6.2 Lo mismo que la tabla 6.1 para la figura 6.6 138
6.3 Lo mismo que la tabla 6.1 para la figura 6.7 139
6.4 Lo mismo que la tabla 6.1 para la figura 6.8 140

7.1 Asignación de frecuencias en (u.a.) de las señales en la figura 7.16 . . 167
7.2 Igual que la tabla 7.1 para la figura 7.17. 169
7.3 Igual que la tabla 7.1 de la figura 7.18 170
7.4 Igual que la tabla 7.1 de la figura 7.19 171

Lista de figuras

2.1 Primeros cinco niveles del árbol de Farey. 19
2.2 Representación esquemática de una red homoclinica. 25
2.3 Definición de superficie de sección de Poincaré. 27
2.4 Superficies de sección de Poincaré compuestas para el sistema Hénon-Heiles a diferentes energías. 28
2.5 Espectros de potencia 31
2.6 Descriptores lagrangianos alrededor de un punto hiperbólico 33
2.7 Descriptores lagrangianos para flujos oceánicos 34
2.8 Superficies de sección de Poincaré y descriptores lagrangianos para la molécula de LiCN. 35

3.1 Esquema del montaje experimental del sistema gotas caminantes. . . 40
3.2 Imágenes de los experimentos de GCs donde se esquematiza la transición *de rebotar a caminar*. 44
3.3 Imágenes de los experimentos de GCs con varias gotas. 52

4.1 Representación de la geometría de los experimentos de dispersión caótica. 64
4.2 Esquema de un experimento numérico de dispersión de átomos de helio por una superficie corrugada de cobre. 67
4.3 Potencial (4.2) usado en las simulaciones de dispersión elástica. . . . 71
4.4 Función de dispersión, representada como ángulo final frente al parámetro de impacto inicial, para la dispersión de átomos de helio con una energía de $E = 21$ meV y un ángulo inicial de $\theta_i = 89.999°$ colisionando con una superficie de cobre con orientación cristalográfica (110). 73
4.5 Función de dispersión del sistema He-Cu(110), ampliación de la zona caótica y dos trayectorias representativas. 75
4.6 Segunda generación de iciclos: Función de dispersión del sistema y una trayectoria representativa. 76

4.7 Función de dispersión del sistema ampliada en la zona caótica, y trayectoria representativa de tercera generación de iciclos. 77
4.8 Árbol simbólico que genera todas las posibles secuencias de órbitas homoclínicas en el régimen hiperbólico. 77
4.9 Variedades estable e inestable de la órbita periódica principal. 79
4.10 Iciclos de primera generación y la representación de los mismos en la sueperficie de sección de Poincaré. 81
4.11 Lo mismo que la figura 4.10 pero para la segunda generación de iciclos. 82
4.12 Trayectoria representativa de la primera generación de iciclos y su proyección en la superficie de sección del mapa de Poincaré, junto con los puntos de corte con la misma. 82
4.13 Lo mismo que la figura 4.12 para la segunda generación de iciclos. . . 83
4.14 Lo mismo que la figura 4.12 pero para la tercera generación de iciclos. 84

5.1 Líneas de equipotencial y superficie de Sección de Poincaré compuesta para dos familias de parámetros del potencial cuártico. 88
5.2 Dos trayectorias representativas de partículas, ambas bajo el efecto de un potencial cuártico y una de ellas bajo el de una fricción tipo Rayleigh, junto con la evolución temporal de sus energías. 91
5.3 Seis trayectorias características de partículas bajo el efecto de un potencial cuártico y una fricción tipo Rayleigh. 93
5.4 Seis trayectorias de la GC características de partículas bajo el efecto de un potencial cuártico y una fricción tipo Rayleigh. 94
5.5 Seis trayectorias características de partículas bajo el efecto de un potencial cuártico y una fricción tipo Rayleigh. 95
5.6 Superficies de sección de Poincaré compuestas para GCs bajo el efecto de un potencial cuártico y una fricción tipo Rayleigh. 96
5.7 Superficies de sección de Poincaré compuestas para partículas bajo el efecto de un potencial cuártico y una fricción tipo Rayleigh (baja memoria). 97
5.8 Estructura del atractor discutido en la sección 5.2.3 para $T_v = 0.3$ y $v_0 = 0.4$ obtenida con la deconstrucción de una trayectoria representativa. 99
5.9 Función de densidad de probabilidad para diferentes valores de T_v. . . 100
5.10 Evolución temporal de la velocidad de tres trayectorias del sistema GCs y velocidad asintótica en función del parámetro de memoria del sistema. 103
5.11 Las mismas tres trayectorias que la figura 5.10 en el espacio de fases, evolución de la energía con el tiempo, y el valor medio de la energía en función del parámetro de memoria del sistema. 105
5.12 Comparación entre la onda instantánea y la promedio para cuatro valores del parámetro de memoria. 106

5.13 Interferencia constructiva y destructiva de funciones de Bessel en función de los puntos de retorno de las trayectorias del sistema GCs. . 109
5.14 Superficie formada por la concatenación de las ondas promedio del sistema en función del parámetro de memoria. 110
5.15 Energía frente al tiempo de 3 trayectorias del sistema GCs con diferentes parámetros de memoria. 114
5.16 Ondas promedio para las tres trayectorias de la figura 5.15. 116
5.17 Funciones de onda cuánticas y ondas promedio del sistema GCs y sus trayectorias asociadas. 119
5.18 Constante de cuantización para el sistema GCs. 120

6.1 Familia de las principales órbitas periódicas del sistema Hénon-Heiles junto con las líneas de equipotencial del sistema. 125
6.2 Superficie de sección compuesta de Poincaré del sistema Hénon-Heiles 126
6.3 Descriptores lagrangianos normalizados según la ec. (6.3) para las tres trayectorias, periódica, cuasiperiódica y caótica de la figura 6.2. . . . 129
6.4 Descriptor lagrangiano normalizado y oscilador lagrangiano, $\Omega(\tau)$, para una trayectoria correspondiente a un oscilador armónico. 132
6.5 Análisis espectral de la órbita periódica Π_8 del sistema Hénon-Heiles (2.50) para una energía de $E = 1/12$. 135
6.6 Lo mismo que la figura 6.5 para una trayectoria cuasiperiódica. 137
6.7 Lo mismo que la figura 6.6 para una trayectoria cuasiperiódica. 138
6.8 Lo mismo que la figura 6.5 para una trayectoria resonante. 139

7.1 Descriptor lagrangiano de los puntos pertenecientes a la superficie de Sección de Poincaré para el sistema de dispersión elástica de helio por una superficie de cobre. 143
7.2 Ampliación y gradiente del descriptor lagrangiano de los puntos pertenecientes a las superficie de sección de Poincaré para el sistema de dispersión elástica de helio por una superficie de cobre. 145
7.3 Función de dispersión y descriptor lagrangiano frente al parámetro de impacto para el sistema de dispersión elástica de átomos de helio por una superficie de cobre. 146
7.4 Ampliación de la zona caótica de la función de dispersión y descriptor lagrangiano frente al parámetro de impacto para el sistema de dispersión elástica de helio por una superficie de cobre. 147
7.5 Energía máxima que puede ganar un átomo de helio al interaccionar con una superficie vibrante de cobre, en función de la frecuencia y amplitud de la oscilación. 149

7.6 Ángulo de dispersión final de átomos de helio al chocar con una superficie vibrante de cobre en función del parámetro de impacto b y del desfase de la vibración ν para diferentes estados de vibración de la superficie. 151
7.7 Descriptor lagrangiano de las trayectorias correspondientes a la dispersión de átomos de helio por una superficie vibrante de cobre en función del parámetro de impacto b y del desfase de la vibración ν. 152
7.8 Evolución de la función de dispersión inelástica $\theta_f(b, \nu)$ con la amplitud de la vibración de la superficie metálica. 154
7.9 Lo mismo que la figura 7.8 pero para condiciones iniciales que pertenecen a la primera generación de iciclos. 156
7.10 Función de dispersión, descriptores lagrangianos, su gradiente y estructura para el sistema de dispersión inelástica de átomos de helio por una superficie vibrante de cobre ampliados en la zona entre 2 iciclos de primera generación. 157
7.11 Tres trayectorias representativas de iciclos de primera generación para partículas de helio al chocar con una superficie vibrante de cobre. . . 159
7.12 Lo mismo que la figura 7.11 pero con una trayectoria de segunda y otra de tercera generación de iciclos. 161
7.13 Representación esquemática de la pila que aproxima las variedades de la órbita periódica inestable principal. 163
7.14 Trayectoria moviéndose por la estructura de entramados apilados. . . 164
7.15 Descriptor lagrangiano normalizado para varias trayectorias del sistema de dispersión helio-cobre y su superficie de sección de Poincaré. 166
7.16 Análisis espectral de la órbita cuasiperiódica en rojo de la figura 7.15(b) del sistema de dispersión He-superficie de cobre para una energía $E =$ 21 meV. 167
7.17 Igual que la figura 7.16 para la órbita cuasiperiódica en verde en la figura 7.15(b). 168
7.18 Igual que la figura 7.16 para la cadena de islas en azul de la figura 7.15(b). 169
7.19 Igual que la figura 7.16 para la una órbita regular del sistema de dispersión inelástico. 171

Capítulo 1

Introducción

La dinámica no lineal y la teoría del caos, que se enmarcan dentro del área matemática de los sistemas dinámicos, supuso un cambio de paradigma en la ciencia de mediados del siglo XX. Su importancia se debe a que muchos sistemas físicos, químicos, matemáticos e incluso económicos y sociales, vienen descritos por ecuaciones con términos no lineales, lo que hace que su estudio se pueda llevar a cabo usando herramientas originalmente desarrolladas en el marco de estas teorías [1].

Una de las figuras más importantes en este campo fue Henri Poincaré, quien puso de manifiesto la existencia del caos y su compleja estructura en sistemas hamiltonianos, en su estudio pionero del *problema de los tres cuerpos* [2]. Sin embargo, la complejidad de los sistemas no lineales hizo que la teoría del caos no se desarrollara adecuadamente hasta los años sesenta con la aparición de los ordenadores digitales y de nuevos métodos numéricos, que permitieron llevar a cabo simulaciones imposibles hasta aquella fecha.

Dentro de los sistemas dinámicos en general tienen una importancia sustancial los que son hamiltonianos (y en particular los conservativos), que son aquellos que pueden ser descritos por la formulación simpléctica hamiltoniana que emplearemos en esta Tesis. Esta formulación permite un estudio sistemático de los sistemas dinámicos en el *espacio de fases*, donde las posiciones y sus momentos conjugados son tratados al mismo nivel [3]. La formulación hamiltoniana ha facilitado el desarrollo de herramientas para el estudio de los sistemas dinámicos, como, por ejemplo, la

superficie de sección de Poincaré, que es de extrema utilidad para desentrañar la estructura del espacio de fases de sistemas de dos grados de libertad. El estudio de los sistemas de más dimensionalidad, donde tienen lugar fenómenos como la *difusión de Arnold* [4], es por el contrario, más complejo de visualizar. Así, se han definido muchos indicadores que sirven para caracterizar el grado de caoticidad de estos sistemas. El teorema de Kolmogorov, Arnold y Moser (KAM) [5] da cuenta de la destrucción de toros invariantes en sistemas hamiltonianos y la correspondiente estructura del espacio de fases de estos sistemas. El desarrollo de nuevas herramientas en este campo sigue siendo un tema de gran interés y actualidad [6].

En general, la mayoría de los sistemas dinámicos no son conservativos. La existencia de términos disipativos o de fuerzas dependientes del tiempo hacen que el comportamiento del sistema exhiba características interesantes. Así, un término disipativo hace que el sistema pierda energía poco a poco hasta alcanzar un punto fijo en el que la dinámica cesa. Por el contrario, la aplicación de fuerzas que dependen del tiempo (sistemas autosostenidos) puede dar lugar a la aparición de *atractores* y *atractores caóticos* [7], como el famoso atractor de Lorenz que da lugar al conocido efecto mariposa. Otros ejemplos importantes son el *oscilador de Duffing* [8] estudiado en 1918 y la *fricción de Rayleigh* [9]. La adición de términos que dependen del tiempo hace que la dimensionalidad de los sistemas anteriores aumente en 0.5 grados de libertad con respecto a los casos conservativos, que no dependen del tiempo. El objetivo central de esta Tesis es precisamente el estudio de este tipo de sistemas no conservativos.

En primer lugar, estudiamos el sistema conocido como gotas caminantes (*walking droplets*). Donde una gota milimétrica permanece rebotando sobre la superficie de un fluido en vibración deformando la misma. La deformación de la superficie a su vez influye en la dinámica de la gota, lo que se asemeja a la dualidad onda-partícula cuántica. El interés en este sistema se debe a que presenta comportamientos macroscópicos similares a los netamente cuánticos, como el efecto túnel, la difracción por una o dos rendijas, la aparición de niveles de energía de Landau, etc. Nuestro estudio se lleva a cabo en dos fases. En una primera aproximación, modelizamos la fuerza que ejerce la superficie sobre la gota con una fricción tipo Rayleigh. A

continuación, con el objetivo de llevar a cabo una descripción más realista de estos sistemas, modelizamos la interacción con la superficie a través de un término integral, junto con una fricción, lo que es formalmente equivalente a un sistema con infinitos grados de libertad.

En segundo lugar, extendemos la aplicación de los llamados *descriptores lagrangianos* [10] al estudio de trayectorias regulares. Esta herramienta ha demostrado ser enormemente efectiva a la hora de analizar las regiones caóticas de multitud de sistemas dinámicos que van desde la descripción de la dinámica oceánica a la caracterización de las vibraciones y reactividad de sistemas moleculares, detectando de forma sencilla y eficaz las variedades que emanan de puntos fijos hiperbólicos. Sin embargo, hasta la fecha su utilidad a la hora de estudiar las regiones con comportamiento regular ha sido bastante limitada. En esta Tesis proponemos un método para calcular las frecuencias características de toros invariantes usando los *descriptores lagrangianos*. Con ello, hemos sido capaces de determinar las frecuencias de los toros del paradigmático sistema de Hénon-Heiles.

Por último, estudiamos la dispersión de átomos de helio que colisionan contra una superficie corrugada de cobre, lo que hace que pueda existir una dinámica caótica. Primero, estudiamos la dinámica cuando la superficie se encuentra estática a cero grados kelvin. En esta situación, la superficie está fija, por lo que el potencial de interacción del helio con ella no depende del tiempo, siendo entonces el sistema conservativo. A continuación, incluimos el efecto de la temperatura. En esta situación, los fonones hacen vibrar a la superficie, lo que hace que el potencial de interacción entre los átomos de helio y la superficie dependa del tiempo periódicamente. En ambos casos nuestro estudio se lleva a cabo, fundamentalmente, aplicando los *descriptores lagrangianos* a este proceso de dispersión más realista.

El contenido de esta Tesis está estructurado en dos partes bien diferenciadas. La primera parte corresponde a la exposición de los fundamentos teóricos que se usan en la segunda parte, que corresponde a los resultados obtenidos por el autor.

Parte I: Teoría

En el Capítulo 2 presentamos el fundamento teórico del trabajo. En primer lugar, se resumen brevemente los fundamentos de la mecánica hamiltoniana. A continuación, se dan unas breves definiciones para saber si un sistema es o no integrable, se exponen los indicadores de caos que vamos a usar en esta Tesis, y se desarrollan las herramientas que usaremos en la descripción de las órbitas y su estabilidad. Por último se muestra un breve resumen de la condición de cuantización de Bohr-Sommerfeld, que será necesaria para uno de los principales resultados de esta Tesis.

En el Capítulo 3 definimos el sistema de gotas caminantes, y hacemos un recorrido por todos los modelos que se han ido proponiendo y usando para la simulación del mismo. Aquí, hacemos especial énfasis en las analogías que existen entre este sistema y la mecánica cuántica, que hacen que sea un problema no solamente interesante por sí mismo sino que, además, puede ser una herramienta de inspiración en el camino de búsqueda de una formulación de la mecánica cuántica causal.

En el Capítulo 4 hacemos una revisión del tema de la dispersión de átomos de helio por una superficie de cobre corrugada estática, modelizando el sistema a través de un hamiltoniano conservativo de dos grados de libertad.

Parte II: Resultados

El Capítulo 5 se dedica al análisis de un *caminante* bajo los efectos de un potencial cuártico, y analizamos las analogías que presenta con la mecánica cuántica. Encontramos la existencia de dos regímenes principalmente, el primero llamado de *baja memoria* en el que solo se tiene en cuenta el efecto de la onda generada en el último rebote del *caminante*, y a *alta memoria* donde se tienen en cuenta todos los rebotes producidos a lo largo de su trayectoria. Para este último régimen hemos obtenido la condición de cuantización que cumple el sistema, que es análoga a la de Bohr-Sommerfeld de la teoría semiclásica. Los resultados que se presentan en este capítulo nos han permitido publicar dos artículos en revistas científicas, el primero de ellos en el año 2017 titulado *"Dynamic localization in walking droplets?"* [11], y el segundo en el año 2019 bajo el título *"Quantization Scheme for the Experiments with Walking Droplets"* [12]. Además, se ha redactado un tercer artículo que está

en proceso de revisión, titulado *"Bohr-Sommerfeld-like quantization in the theory of walking droplets"* [13].

El Capítulo 6 se dedica a la profundización y mejora del uso de los *descriptores lagrangianos* para la caracterización de trayectorias regulares, definiendo una transformación de los mismos que nos servirá como método para calcular sistemáticamente las frecuencias fundamentales de un sistema para dos grados de libertad, aunque puede aplicarse fácilmente a sistemas con cualquier número de dimensiones. Los resultados que se han mostrado en este capítulo nos han permitido redactar un artículo titulado *"Lagrangian descriptors for regular motion"*, que está en proceso revisión para su publicación en una revista científica [14].

En el Capítulo 7 se desarrolla y estudia una descripción más realista de la dispersión caótica que en el Capítulo 4, incorporando el efecto de vibración que provoca la temperatura sobre la superficie, lo que equivale a aumentar en medio grado la dimensionalidad del sistema. El análisis se llevará a cabo por medio de los *descriptores lagrangianos* poniendo de manifiesto la utilidad de los mismos en un sistema de este tipo y profundizando en los usos de esta herramienta.

Por último, en el Capítulo 8 presentamos las principales conclusiones de esta Tesis Doctoral, seguido de una lista con todas las referencias.

Parte I

Teoría

Capítulo 2

Mecánica hamiltoniana, caos y cuantización

Los sistemas dinámicos son aquellos cuyo estado evoluciona en el tiempo. Esta simple definición permite entender su gran importancia debido a su carácter ubicuo, lo que hace que las herramientas desarrolladas para su estudio tengan aplicaciones hoy en día en los más variados campos, que van desde la física y las matemáticas hasta la economía, la biología o las ciencias sociales [1]. En esta Tesis Doctoral se analizarán dos sistemas con dos o más grados de libertad, se estudiará su comportamiento dinámico y se establecerán las analogías con la mecánica cuántica en uno de ellos.

En este capítulo nos vamos a centrar en el formalismo básico con el que se suelen modelizar y analizar muchos de los sistemas físicos, fundamentalmente mecánicos. En primer lugar en la sección 2.1 resumimos brevemente el formalismo de Hamilton de la mecánica clásica. A continuación, en la sección 2.2, nos centramos en las condiciones de integrabilidad de los mismos. En la sección 2.3 vamos a definir la *notación simpléctica*. Explicaremos en la sección 2.4 cómo linealizar las ecuaciones del movimiento de las correspondientes trayectorias en el espacio de las fases, lo que nos permitirá analizar la estabilidad de las órbitas periódicas, que son aquellas trayectorias que se retrazan a sí mismas. Después, en la sección 2.5, discutimos algunos indicadores de caos, condición dinámica opuesta a la integrabilidad. En la sección 2.6 se describen los descriptores lagrangianos y se hace una breve revisión de

cómo se han aplicado a diferentes sistemas, haciéndo énfasis en su enorme utilidad para desentrañar la complejidad del movimiento caótico. Por último, en la sección 2.7, nos centramos en la condición de cuantización de Bohr-Sommerfeld que permite profundizar en la correspondencia entre la mecánica clásica y la cuántica, con la llamada aproximación semiclásica.

2.1 El formalismo de Hamilton

Existen diferentes formulaciones de la mecánica clásica [3], siendo las más usadas aún hoy en día la newtoniana, la lagrangiana y la hamiltoniana, ocupando esta última un lugar preferente entre todas ellas en el campo de la dinámica no-lineal [3].

Representaremos con q_i y $\dot{q}_i$ a la coordenada y su velocidad, respectivamente, asociados al grado de libertad $i = 1, ..., N$, donde N es el número de grados de libertad de un sitema dinámico. En los sistemas mecánicos, se define la lagrangiana como una función de las posiciones y las velocidades anteriores, que viene dado por la diferencia entre la energía cinética y la potencial

$$\mathcal{L}(\mathbf{q}, \dot{\mathbf{q}}, t) = T(\dot{\mathbf{q}}, t) - V(\mathbf{q}, t). \tag{2.1}$$

La formulación hamiltoniana de la mecánica clásica estudia el movimiento de una partícula tratando por igual las posiciones, $\mathbf{q}$, y sus correspondientes momentos conjugados, $\mathbf{p}$, [15]

$$p_i = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{q}_i}, \tag{2.2}$$

cuya evolución temporal define *trayectorias* en el llamado *espacio de fases*, que es $2N$ dimensional. El objeto principal en el que se basa el formalismo de Hamilton es la llamada *función hamiltoniana* o, simplemente, *hamiltoniana* $\mathcal{H}$, que se define como la transformada de Legendre de la función lagrangiana $\mathcal{L}$, para eliminar las velocidades $\dot{\mathbf{q}}$,

$$\mathcal{H} \equiv \mathcal{H}(\mathbf{q}, \mathbf{p}, t) = \sum_{i=1}^{N} p_i \dot{q}_i - \mathcal{L}(\mathbf{q}, \dot{\mathbf{q}}, t) = T(\mathbf{p}, t) + V(\mathbf{q}, t) \quad . \tag{2.3}$$

Esta cantidad es la energía mecánica o energía total del sistema. Además, si la energía potencial del sistema no depende del tiempo, $V(\mathbf{q})$, entonces el sistema es conservativo y la hamiltoniana es constante, es decir, la energía total del sistema se conserva.

2.1.1 Ecuaciones del movimiento

La acción de una trayectoria entre los tiempos t_a y t_b se define como

$$\mathcal{S} = \int_{t_a}^{t_b} \mathcal{L}(\mathbf{q}, \dot{\mathbf{q}}, t)\, dt. \tag{2.4}$$

De acuerdo con el formalismo de Hamilton, los sistemas dinámicos evolucionan de forma que la acción (2.4) presenta un extremo, de manera que

$$\delta\mathcal{S} = 0, \tag{2.5}$$

lo que nos lleva a la ecuación de Euler-Lagrange, que es la condición que deben de cumplir nuestras trayectorias para que se respete el principio de mínima acción (2.5)

$$\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial q_i} - \frac{d}{dt}\left(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{q}_i}\right) = 0. \tag{2.6}$$

Resolviendo ahora el sistema de ecuaciones diferenciales de primer orden (2.6) (ecuaciones del movimiento), obtenemos la trayectoria de nuestra partícula.

Otra forma que existe de calcular las ecuaciones del movimiento es teniendo en cuenta las ecuaciones 2.3 y 2.5, con lo que se llega a

$$\delta \int \left[\sum_{i=1}^{N} p_i \dot{q}_i - \mathcal{H}(\mathbf{q}, \mathbf{p}, t) dt\right] = 0, \tag{2.7}$$

obteniendo las ecuaciones de Hamilton

$$\dot{q}_i = \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial p_i}, \quad \dot{p}_i = -\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial q_i}, \quad \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial t} = -\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial t}, \tag{2.8}$$

que son las ecuaciones del movimiento de una partícula en el espacio de fases.

2.1.2 Transformaciones canónicas

En física es importante usar un buen sistema de coordenadas, ya que esta elección puede ayudar a entender y a analizar mejor un determinado problema. En general, un cambio de coordenadas significa también un cambio en las ecuaciones del movimiento, pero no siempre es así.

En el caso de la mecánica hamiltoniana llamaremos *transformación canónica* a aquella transformación de coordenadas que mantenga invariante la estructura de las ecuaciones de Hamilton (2.8) (también llamada estructura simpléctica) [16]. El cambio $(\mathbf{q}, \mathbf{p}) \rightarrow (\mathbf{Q}, \mathbf{P})$ debe ser tal que las nuevas coordenadas satisfagan las ecuaciones del movimiento

$$\dot{Q}_i = \frac{\partial \mathcal{H}'}{\partial P_i}, \quad \dot{P}_i = -\frac{\partial \mathcal{H}'}{\partial Q_i}, \tag{2.9}$$

donde $\mathcal{H}'$ es el hamiltoniano expresado en función de las nuevas coordenadas. La característica más fundamental de estos sistemas es que su evolución temporal preserva el volumen del espacio de fases (Teorema de Liouville [3, 16])

$$\int \prod_{j=1}^{N} dq_j \prod_{i=1}^{N} dp_i = \int \prod_{j=1}^{N} dQ_j \prod_{i=1}^{N} dP_i. \tag{2.10}$$

La ecuación anterior es la condición necesaria de transformación canónica que deben de cumplir las nuevas coordenadas $(\mathbf{Q}, \mathbf{P})$ (notación de Goldstein) [3]. Para obtener un procedimiento útil se deben elegir los momentos o coordenadas antiguos como N variables independientes, y las coordenadas o momentos nuevos como las N variables independientes que faltan. Además, las nuevas coordenadas deben de cumplir una ecuación como la dada por la expresión (2.7)

$$\delta \int \left[\sum_{i=1}^{N} P_i \dot{Q}_i - \mathcal{H}'(\mathbf{Q}, \mathbf{P}, t) dt \right] = 0. \tag{2.11}$$

Para que las ecuaciones (2.7) y (2.11) se satisfagan simultáneamente deben de cumplir la siguiente igualdad

$$\varrho(p_i \dot{q}_i - \mathcal{H}) = P_i \dot{Q}_i - \mathcal{H}' + \frac{d\mathcal{F}}{dt}, \tag{2.12}$$

donde ϱ es solo un factor de escala y $\mathcal{F}$ es llamada función *generatriz* o *generador* de la transformación. Hacer una transformación de escala mantiene siempre invariantes las ecuaciones de Hamilton. Por ese motivo, si tenemos una transformación canónica con $\varrho \neq 1$ (transformación canónica *extensa*) podemos concatenar una de escala que nos dé una transformación equivalente a haber considerado desde el principio $\varrho = 1$, por lo que se suele fijar $\varrho = 1$ por defecto.

Existen varias alternativas a la hora de definir la función generatriz. Por un lado, como hay una dependencia $Q_i = Q_i(\mathbf{q}, \mathbf{p}, t)$, la función generatriz se puede expresar como mezcla de coordenadas antiguas y nuevas $\mathcal{F} = \mathcal{F}_1(\mathbf{q}, \mathbf{Q}, t)$ (la dependencia de las coordenadas antiguas no es solamente en $\mathbf{q}$, sino que también puede ser en $\mathbf{p}$, como veremos más adelante). Tenemos entonces

$$p_i\dot{q}_i - \mathcal{H} = P_i\dot{Q}_i - \mathcal{H}' + \frac{d\mathcal{F}_1}{dt} = P_i\dot{Q}_i - \mathcal{H}' + \frac{\partial\mathcal{F}_1}{\partial t} + \frac{\partial\mathcal{F}_1}{\partial q_i}\dot{q}_i + \frac{\partial\mathcal{F}_1}{\partial Q_i}\dot{Q}_i. \tag{2.13}$$

Como las coordenadas antiguas y las nuevas son independientes por separado, las ecuaciones anteriores se cumplen solo si

$$p_i = \frac{\partial\mathcal{F}}{\partial q_i}, \quad P_i = -\frac{\partial\mathcal{F}}{\partial Q_i}, \tag{2.14}$$

quedando

$$\mathcal{H}' = \mathcal{H} + \frac{\partial\mathcal{F}_1}{\partial t}. \tag{2.15}$$

Por otro lado, a veces no es conveniente describir la transformación en función de $\mathbf{q}$ y $\mathbf{Q}$, en cuyo caso se puede hacer también en función de los momentos $\mathbf{p}$ y $\mathbf{P}$. Expresando $\mathcal{F} = \mathcal{F}_2(\mathbf{q}, \mathbf{P}, t) - Q_iP_i$ tenemos

$$p_i\dot{q}_i - \mathcal{H} = -P_i\dot{Q}_i - \mathcal{H}' + \frac{d\mathcal{F}_2(\mathbf{q}, \mathbf{P}, t)}{dt}. \tag{2.16}$$

De forma análoga, y en función de nuestros intereses, podemos usar también las funciones generatrices de los siguientes tipos

$$\mathcal{F}_3(\mathbf{p}, \mathbf{Q}, t) \to \mathcal{F} = q_ip_i + \mathcal{F}_3, \tag{2.17}$$

$$\mathcal{F}_4(\mathbf{p}, \mathbf{P}, t) \to \mathcal{F} = q_ip_i - Q_iP_i + \mathcal{F}_4. \tag{2.18}$$

2.2 Sistemas integrables y no integrables

2.2.1 Sistemas integrables

Un sistema hamiltoniano de N grados de libertad es integrable si y solo si existen N constantes del movimiento en involución, esto es, N funciones del espacio de fases f_i cuyos corchetes de Poisson se anulan entre sí

$$\{f_i, f_j\} = 0, \quad (i, j = 1, \ldots, N, \quad i \neq j). \tag{2.19}$$

En los sistemas integrables, el espacio de fases está compuesto por toros, que son variedades[1] invariantes que las trayectorias van recorriendo. En las variables acción y ángulo $(\mathbf{I}, \boldsymbol{\theta})$, la superficie del toro solo dependerá paramétricamente de las variables acción definidas como

$$I_i = \frac{1}{2\pi} \oint p_i \, dq_i. \tag{2.20}$$

Las variables acción y ángulo se pueden obtener llevando a cabo una transformación canónica de manera que se conserve la estructura de las ecuaciones del movimiento, que pasarán a ser

$$\dot{I}_i = -\frac{\partial \mathcal{H}'}{\partial \theta_i} = 0, \quad \dot{\theta}_i = \frac{\partial \mathcal{H}'}{\partial I_i} = \omega_i. \tag{2.21}$$

La solución a este sistema es trivial

$$I_i(t) = I_i(0), \quad \theta_i(t) = \theta_i(0) + \omega_i t. \tag{2.22}$$

También se puede hacer la transformación canónica usando la acción como función generatriz como se ha expuesto anteriormente (ver sección 2.1.2 para más detalles), obteniendo

$$\theta_i = \frac{\partial \mathcal{S}(I_i, q_i)}{\partial I_i}. \tag{2.23}$$

[1] Una variedad es la generalización de la noción de curva, superficie, etc. a cualquier dimensión n. Es un objeto geométrico de dimensión n continuo e infinitamente diferenciable que se parece localmente a $\mathbb{R}^n$.

De acuerdo con las anteriores ecuaciones del movimiento, vamos a tener N frecuencias ω_i. Clasificaremos las trayectorias en función de las relaciones entre las diferentes ω_i. Si las frecuencias están en resonancia ($\omega_i/\omega_j \in \mathbb{Q}$ es un número racional para $i \neq j$), la trayectoria se cerrará tras un periodo y la llamaremos *órbita periódica* (OP). De lo contrario, cuando ω_i/ω_j es un número irracional para $i \neq j$ tendremos una trayectoria con periodo infinito que cubrirá densamente el toro y se denominará *trayectoria cuasiperiódica*.

Para 2 grados de libertad, una trayectoria periódica cumple que

$$\frac{\omega_1}{\omega_2} = \frac{n}{m}, \quad n, m \in \mathbb{Z}. \tag{2.24}$$

Esto se puede generalizar para N grados de libertad como

$$\boldsymbol{\omega} \cdot \mathbf{n} = 0, \quad \boldsymbol{\omega} = \{\omega_i\}, \quad \mathbf{n} = \{n_i \in \mathbb{Z}\}, \tag{2.25}$$

donde $\mathbf{n}$ es un vector de números enteros.

2.2.2 Sistemas no integrables

Un sistema hamiltoniano de N grados de libertad es no integrable si no tiene N constantes del movimiento. La consecuencia de esto es que el espacio de fases es muy diferente al de los sistemas integrables, ya que, mientras que estos últimos los toros invariantes existen en todo el espacio de fases, haciendo que el movimiento sea regular, en los sistemas no integrables hay regiones sin toros, permitiendo que algunas trayectorias tengan un movimiento caótico.

Una buena forma de entender cómo se organiza el espacio de fases de los sistemas no integrables es comenzar con un sistema integrable, descrito a través de un hamiltoniano $\mathcal{H}_0$, que se perturba con un término $\epsilon\mathcal{H}''$, donde el parámetro $\epsilon \ll 1$ determina la fuerza de la perturbación [16]. El hamiltoniano total del sistema se puede expresar entonces como

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_0 + \epsilon\mathcal{H}''. \tag{2.26}$$

A medida que el valor de ϵ va aumentando, los toros se van rompiendo, tal y como dicta el teorema de KAM (desarrollado por Kolmogorov, Arnold y Moser) [5].

El teorema KAM establece que si un sistema está sometido a una pequeña perturbación no lineal algunos toros sólo serán deformados y otros destruidos. Los que sobreviven son aquellos que tienen un cociente de frecuencias "suficientemente irracional". Es decir, se destruyen primero aquellos cuyo cociente de frecuencias se acerca más a un número racional, de acuerdo a la relación

$$\left|\frac{\omega_1}{\omega_2} - \frac{s}{l}\right| > \frac{\kappa(\epsilon)}{\sqrt{l}}, \tag{2.27}$$

donde s y l son números enteros que hacen que el cociente s/l se acerque tanto a $\dfrac{\omega_1}{\omega_2}$ que la diferencia sea una cantidad del orden de $(\sqrt{l})^{-1}$, y $\kappa(\epsilon)$ es una función complicada de la perturbación.

De acuerdo a lo anterior, cuando $\kappa(\epsilon)$ aumenta suficientemente todos los toros se destruyen. El último toro en destruirse es el que presenta la relación de frecuencias más irracional de todas (véase la sección 2.2.3), que es igual al número áureo

$$\varphi = \frac{(1+\sqrt{5})}{2} \simeq 1.6180339... \tag{2.28}$$

Las trayectorias que antes se movían por toros que se han roto, ahora se mueven *libremente* por el espacio de fases cerca de los toros no destruidos, formando un conjunto que explora un subespacio de dimensión $2N-1$ del sistema (si la energía mecánica es la única constante del movimiento).

¿Qué ocurre con las trayectorias resonantes en $\mathcal{H}_0$ por efecto de la perturbación? Obviamente, al ser $\dfrac{\omega_1}{\omega_2}$ racional, estas trayectorias se detruyen para cualquier valor de ϵ. Su destino viene descrito por el teorema de Poincaré-Birkhoff [1], que prescribe que no todas las trayectorias regulares de un toro resonante se destruyen, sino que sobreviven un número par de ellas, la mitad elípticas y la otra mitad hiperbólicas. Esto determina el aspecto que tendrá entonces el espacio de fases ya que el teorema KAM será válido aquí también. Las curvas invariantes alrededor de puntos elípticos que no se hayan destruido, tendrán en su entorno un conjunto de puntos elípticos e hiperbólicos procedentes de las curvas racionales próximas que se han roto, que

a su vez están también rodeados por curvas del mismo tipo y así *ad infinitum* en una estructura fractal autosemejante. Dado que cerca de un irracional existe una aproximación racional, siempre tendremos un conjunto denso de OPs tan cerca como queramos de un punto en el espacio de fases.

2.2.3 Números irracionales y fracciones continuadas

Como acabamos de comentar, el teorema de KAM nos dice que los toros que sobreviven tras una perturbación tienen una relación de frecuencias suficientemente irracional. Existe un criterio para determinar el orden en el que se van rompiendo los toros en función de esa relación (2.27) basado en las llamadas *fracciones continuadas*.

Supongamos un toro con una relación de frecuencias irracional $\frac{\omega_1}{\omega_2} = \sigma$. Existen diferentes secuencias de racionales que aproximan σ, pero, dependiendo de la serie utilizada, se necesitarán más o menos términos para una misma aproximación; es decir, las series convergerán más rápido o más lento. Las mejores aproximaciones racionales se obtienen empleando las expansiones en fracciones continuadas como

$$\sigma = a_0 + \cfrac{1}{a_1 + \cfrac{1}{a_2 + \cfrac{1}{a_3 + ...}}}, \qquad (i = 1, 2..., \infty) \tag{2.29}$$

donde a_0 es un número entero, y el resto a_i son naturales que se obtienen de la forma siguiente: a_0 es la parte entera de σ, a_1 es la parte entera del inverso de $(\sigma - a_0)$, a_2 es la parte entera de inverso del resto de a_1, etc. Si queremos aproximar por ejemplo $\sigma = \pi$, se obtiene

$$\sigma = \pi = 3 + \cfrac{1}{7 + \cfrac{1}{15 + \cfrac{1}{292 + ...}}}. \tag{2.30}$$

Los sucesivos aproximantes van a ser una serie de números racionales n_i/m_i que aproximan σ y la convergencia viene dada por

$$\left|\sigma - \frac{n_i}{m_i}\right| < \frac{1}{m_i m_{i-1}}. \tag{2.31}$$

La expansión en fracciones continuadas para σ converge más deprisa conforme más rápido diverja la secuencia de los parámetros a_i. Para el caso particular en que $\sigma = \pi$ la serie converge rápidamente ya que el quinto término es $a_4 = 292$ que es un número grande. Por el contrario el número irracional que tiene la peor convergencia es el que tiene todos los términos $a_i = 1$

$$\sigma = \varphi = \cfrac{1}{1 + \cfrac{1}{1 + \cfrac{1}{1 + \cfrac{1}{1 + ...}}}}, \tag{2.32}$$

lo que da como resultado el número áureo (2.28), que por ese motivo se considera el número *más* irracional de todos. En consecuencia, como hemos dicho antes, los toros que tengan esta relación de frecuencias serán lo últimos en romperse.

El esquema anterior de estructuras autosemejantes de curvas irracionales y puntos racionales se puede explicar de forma esquemática con el árbol de Farey, que permite organizar los números racionales en secuencias de mejores convergentes a un número racional o irracional dado. Además, el árbol de Farey es equivalente a las fracciones continuadas, puesto que se puede construir en base a ellas.

Existen muchas formas de obtener el árbol de Farey. Una de ellas consiste en comenzar por los extremos del intervalo unidad $\frac{0}{1}$ y $\frac{1}{1}$. Los términos para los siguientes pasos de iteración se calculan "sumando" los números posterior y anterior (numeradores por un lado y denominadores por otro) y simplificando. Un ejemplo es el caso $\frac{0}{1} \oplus \frac{1}{1} \equiv \frac{0+1}{1+1} = \frac{1}{2}$ cuyos siguientes términos de la rama serían $\frac{0}{1} \oplus \frac{1}{2} \equiv \frac{0+1}{1+2} = \frac{1}{3}$, $\frac{0}{1} \oplus \frac{1}{3} \equiv \frac{0+1}{1+3} = \frac{1}{4}$ como se puede ver en el esquema del árbol mostrado en la figura 2.1.

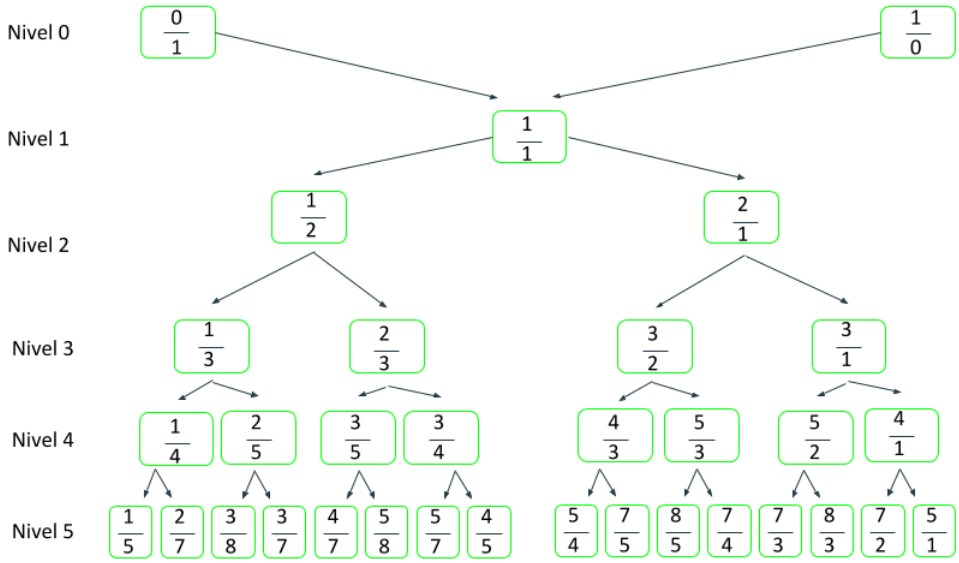


Figura 2.1: Primeros cinco niveles del árbol de Farey.

2.3 Notación simpléctica

Para escribir de forma compacta las ecuaciones del movimiento vamos a introducir la *notación simpléctica*. Para ello vamos a definir el vector $\mathbf{z}(t)$, que tiene $2N$ elementos definidos como $z_i = q_i$ y $z_{i+N} = p_i$ con $i = 1, 2, ..., N$, como

$$\mathbf{z}(t) = \begin{pmatrix} \mathbf{q}(t) \\ \mathbf{p}(t) \end{pmatrix}. \tag{2.33}$$

Las ecuaciones de Hamilton usando esta notación se reducen a

$$\dot{\mathbf{z}} = \mathbf{J}\frac{d\mathcal{H}}{d\mathbf{z}}, \tag{2.34}$$

donde aparece el vector $\left(\frac{d\mathcal{H}}{d\mathbf{z}}\right)$ que tiene como componentes $\frac{d\mathcal{H}}{dz_i} = \frac{d\mathcal{H}}{dq_i}$, $\frac{d\mathcal{H}}{dz_{i+N}} = \frac{d\mathcal{H}}{dp_i}$ y la matriz $\mathbf{J}$, que es

$$\mathbf{J} = \begin{pmatrix} \mathbf{0_N} & \mathbf{1_N} \\ \mathbf{-1_N} & \mathbf{0_N} \end{pmatrix}. \tag{2.35}$$

2.4 Dinámica linealizada

En esta sección nos vamos a centrar en el estudio de las ecuaciones del movimiento linealizadas, que son las que gobiernan la dinámica de las trayectorias próximas a una órbita de referencia, lo que nos permite estudiar la estabilidad de la órbita, así como la estructura del espacio de fases cerca de la misma.

La dinámica en la vecindad de una órbita se puede describir integrando las ecuaciones del movimiento debidamente linealizadas [16]. Para ello, llevamos a cabo un desarrollo de Taylor truncado a primer orden alrededor de una órbita de referencia con coordenadas $\mathbf{q}(t)$ y de $\mathbf{p}(t)$ y condiciones iniciales $\mathbf{q}_0$ y $\mathbf{p}_0$, como

$$\mathbf{q}'(t) \approx \mathbf{q}(t) + \frac{\partial \mathbf{q}(t)}{\partial \mathbf{q}_0}\delta\mathbf{q}_0 + \frac{\partial \mathbf{q}(t)}{\partial \mathbf{p}_0}\delta\mathbf{p}_0, \tag{2.36}$$

$$\mathbf{p}'(t) \approx \mathbf{p}(t) + \frac{\partial \mathbf{p}(t)}{\partial \mathbf{q}_0}\delta\mathbf{q}_0 + \frac{\partial \mathbf{p}(t)}{\partial \mathbf{p}_0}\delta\mathbf{p}_0. \tag{2.37}$$

Las relaciones $\delta\mathbf{q}(t) = \mathbf{q}'(t) - \mathbf{q}(t)$ y $\delta\mathbf{p}(t) = \mathbf{p}'(t) - \mathbf{p}(t)$ nos permiten escribir las ecuaciones(2.36) y (2.37) en *forma matricial* como

$$\begin{pmatrix} \delta\mathbf{q}(t) \\ \delta\mathbf{p}(t) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{\partial \mathbf{q}(t)}{\partial \mathbf{q}_0} & \frac{\partial \mathbf{q}(t)}{\partial \mathbf{p}_0} \\ \frac{\partial \mathbf{p}(t)}{\partial \mathbf{q}_0} & \frac{\partial \mathbf{p}(t)}{\partial \mathbf{p}_0} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \delta\mathbf{q}_0 \\ \delta\mathbf{p}_0 \end{pmatrix} = \mathcal{M}(t) \begin{pmatrix} \delta\mathbf{q}_0 \\ \delta\mathbf{p}_0 \end{pmatrix}, \tag{2.38}$$

donde $\mathcal{M}(t)$, es llamada *matriz Jacobiana*, que en los casos en los que nuestra órbita de referencia sea una OP integrada a lo largo de un periodo se llamará *matriz de monodromía*.

Podemos escribir esta dinámica de forma mucho más compacta utilizando la notación simpléctica. La dinámica en la vecindad de nuestra órbita se puede obtener con $\mathbf{z}_0' = \mathbf{z}_0 + \delta\mathbf{z}_0$, donde $\delta\mathbf{z}_0 = \begin{pmatrix} \delta\mathbf{q}_0 \\ \delta\mathbf{p}_0 \end{pmatrix}$, lo que después de un tiempo arbitrario nos dará el punto $\mathbf{z}'(t) = \mathbf{z}(t) + \delta\mathbf{z}(t)$, siendo $\delta\mathbf{z}(t) = \begin{pmatrix} \delta\mathbf{q}(t) \\ \delta\mathbf{p}(t) \end{pmatrix}$. Si el desplazamiento inicial es lo suficientemente pequeño, entonces se cumple la siguiente relación lineal

$$\delta\mathbf{z}(t) = \mathcal{M}(t)\delta\mathbf{z}_0. \tag{2.39}$$

Para simplificar los cálculos podemos eliminar 2 autodirecciones del movimiento triviales, que van a lo largo de la OP. Esto se debe a que si se perturba el sistema a lo largo de la misma, después de un periodo T estaremos en el mismo punto de partida dentro de la órbita, por lo que 2 autovalores de la matriz de monodromía son 1.

La matriz $\mathcal{M}(t)$ es simpléctica, lo que hace que tenga importantes propiedades como las siguientes (en el caso de dos grados de libertad):

1. Si los autovalores de la matriz η son complejos, entonces $1/\eta$ y $1/\eta^*$, donde * denota el complejo conjugado, son también autovalores.

2. Si los autovalores son reales, entonces 2 autovalores valen la unidad y el otro par son η y $1/\eta$.

2.4.1 Caracterización de órbitas periódicas

Muchas de las investigaciones en dinámica no lineal requieren del estudio del movimiento periódico y sus propiedades de estabilidad, ya que estos son un aspecto clave para entender la estructura del espacio de fases.

Para ello es importante estudiar lo que ocurre en la vecindad de las OPs estables o inestables, ya que eso nos dará información relevante de su estabilidad. Este estudio se llevará a cabo linealizando las ecuaciones del movimiento (como se ha explicado en la sección 2.4).

En esta sección seguiremos considerando un sistema de 2 grados de libertad y, por tanto, un espacio de fases con 4 coordenadas, es decir, nuestro vector $\mathbf{z}$ será $\mathbf{z} = (x, y, p_x, p_y)$.

Estabilidad de las órbitas periódicas

Eliminando las direcciones triviales del movimiento (que son las direcciones de movimiento de la propia órbita), podemos expresar la evolución del sistema en coordenadas curvilíneas, tomando $x_\perp$ como la longitud desde el punto de partida hasta el punto actual, siendo $y_\perp$ el eje perpendicular a la órbita de referencia, que nos da la diferencia que hay entre la órbita objeto de estudio y la trayectoria vecina.

Resolviendo las ecuaciones del movimiento para la trayectoria perturbada, y cambiando a coordenadas curvilíneas podemos propagar la perturbación en un periodo T, siendo entonces la matriz de monodromía transversal

$$\mathcal{M}(T) = \begin{pmatrix} m_{11} & m_{12} \\ m_{21} & m_{22} \end{pmatrix}. \tag{2.40}$$

Para diagonalizar la matriz y obtener sus autovalores es necesario resolver su polinomio característico, dado por

$$\eta_\pm^2 - \eta_\pm \tau + \Delta = 0, \tag{2.41}$$

donde τ es la traza de la matriz $\mathcal{M}(T)$ y Δ su determinante, que en este caso es la unidad por ser una matriz simpléctica. Los autovalores son $\eta_\pm$, conocidos con el nombre de *exponentes o multiplicadores de Floquet* cuyo valor es

$$\eta_\pm = \frac{1}{2}\left(\tau \pm \sqrt{\tau^2 - 4}\right). \tag{2.42}$$

Los autovalores pueden ser reales o complejos, dando lugar a tres casos:

1. En el caso en que sean reales ($|\tau| > 2$), se pueden expresar como

   $$\eta_\pm = \pm e^{\pm \lambda T}, \tag{2.43}$$

   donde λ es llamado *coeficiente de estabilidad* de la OP, que en este caso será inestable. Si el signo que le precede es "+" entonces será hiperbólica, y si es "−" será hiperbólica con reflexión.

2. Si los autovalores valen $\eta_\pm = \pm 1$, ($|\tau| = 2$) entonces tendremos una órbita marginalmente estable.

3. Por último, si los autovalores son complejos, ($|\tau| < 2$) se pueden escribir como

$$\eta_{\pm} = e^{\pm i\omega T}, \tag{2.44}$$

donde ω y T son, respectivamente, la frecuencia propia y el periodo de la OP, que será estable o elíptica.

Variedades e índice de Maslov

Cada uno de los autovalores de la matriz de monodromía transversal de una OP inestable tiene asociado un autovector, el asociado a la variedad inestable ξ_u y el asociado a la estable ξ_s.

En el régimen lineal, cualquier punto en la superficie de sección de Poincaré situado a lo largo de la recta paralela al autovector ξ_u en la posición $(y, p_y) = c_u\xi_u$, donde c_u es una constante de proporcionalidad, permanecerá en la recta alejándose exponencialmente de la OP de acuerdo con

$$\xi_u'(t) = \mathcal{M}(t)\xi_u' = \pm e^{\lambda t} c_u \xi_u, \tag{2.45}$$

lo que nos define una variedad inestable. Del mismo modo, cualquier punto situado paralelo al autovector ξ_s permanecerá paralelo a el acercándose exponencialmente a la OP

$$\xi_s'(t) = \mathcal{M}(t)\xi_s' = \pm e^{-\lambda t} c_s \xi_s, \tag{2.46}$$

motivo por el que se denomina variedad estable a la dirección paralela a ξ_s.

En la vecindad de la órbita se define el *winding number o fase topológica* μ, si esta asociado a una OP inestable también es llamado *índice de Maslov*, que tiene una importancia fundamental en mecánica semiclásica en general y en esta Tesis en particular. *Grosso modo*, μ se puede definir como el número de semivueltas que daría una partícula situada sobre una de las variedades de la OP alrededor de la misma al evolucionar un periodo [17].

Si μ es un número par, los autovalores de $\mathcal{M}(T)$ son positivos y la trayectoria volverá a una posición paralela a la inicial tras un periodo. Como hemos indicado más arriba, la trayectoria dependiendo si estamos en la variedad estable o inestable

se contraerá o dilatará respectivamente, lo que nos permite reescribir las ecuaciones (2.45) y (2.46) incluyendo el índice de Maslov

$$\xi_u'(T) = \mathcal{M}(T)\xi_u' = (-1)^\mu e^{\lambda T}\xi_u, \tag{2.47}$$

$$\xi_s'(T) = \mathcal{M}(T)\xi_s' = (-1)^\mu e^{-\lambda T}\xi_s, \tag{2.48}$$

Si nos alejamos del régimen lineal, la variedad comienza a doblarse y plegarse, cortándose entre sí la variedad estable y la inestable dando lugar a la maraña heteroclínica que vislumbró Poincaré. Los puntos en los que se cruzan las variedades procedentes de la mismo punto fijo hiperbólico se llaman puntos homoclínicos y los cruces de las variedades procedentes de diferentes puntos fijos hiperbólicos se denominan puntos heteroclínicos.

Del mismo modo que ocurre en los sistemas ligados, en los abiertos o de colisión la aparición de caos es consecuencia de la existencia de una red homoclínica o heteroclínica, en la que las variedades estable e inestable asociadas a un punto fijo inestable, correspondiente a un movimiento periódico, dan lugar a una infinitud de cruces, que junto con los mecanismos de pliegue y elongación asociados dan lugar a una dinámica extremadamente compleja y caótica. Este proceso se ilustra esquemáticamente en la figura 2.2, donde se repesentan el punto fijo inestable $\mathbf{P}$ y las correspondientes variedades inestable, $W^+(\mathbf{P})$, y estable, $W^-(\mathbf{P})$. Estas se cruzan por primera vez en el punto homoclínico primario h_0, y a partir de ahí en un número infinito de cruces que pueden obtenerse aplicando al mismo el mapa de Poincaré que da lugar a $\mathbf{P}$ adelante y atrás en el tiempo obteniendo así las secuencias $h_1, h_2, h_3, \ldots$ y $h_{-1}, h_{-2}, h_{-3}, \ldots$, respectivamente. Superpuesto a esta estructura tenemos dos propiedades de los sistemas dinámicos hamiltonianos. Por una parte tenemos que las variedades no se pueden cruzar a sí mismas, sino sólo entre sí, y, además, que el (hiper)volumen en el espacio de fases se debe conservar en el tiempo. Como consecuencia, los segmentos entre cruces homoclínicos se van plegando en sucesivas iteraciones del mapa, que a su vez se van estirando en la dirección perpendicular. El efecto neto es la formación de la red homoclínica compleja que se muestra en la figura 2.2.

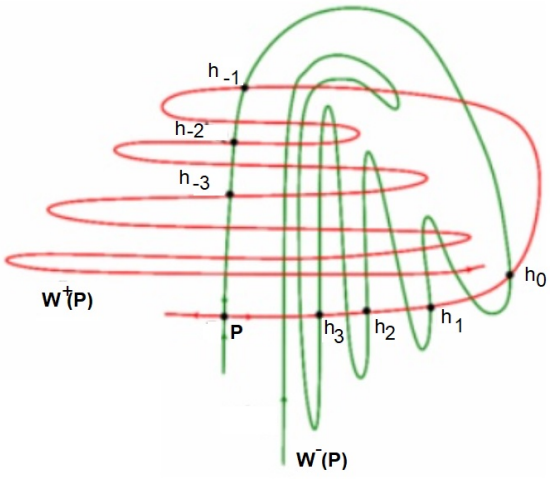


Figura 2.2: Representación esquemática de una red homoclínica correspondiente al punto fijo inestable **P**. Las correspondientes variedades inestable, $W^+(\mathbf{P})$, y estable, $W^-(\mathbf{P})$, se muestran en rojo y verde, respectivamente. Estas se cortan en una infinitud de puntos homoclínicos $\ldots, h_{-3}, h_{-2}, h_{-1}, h_0, h_1, h_2, h_3, \ldots$, que se obtienen como se describe en el texto.

A pesar de este origen común, el comportamiento caótico de los sistemas abiertos es diferente al de los sistemas ligados, dado que en el caso de los sistemas de dispersión (no ligados) aparecen comportamientos peculiares, que se derivan del hecho de que la dinámica en los sistemas de dispersión es integrable, antes y después de la colisión, siendo caótica únicamente debido al movimiento durante un intervalo de tiempo finito que tiene lugar en una región, donde la interacción es importante. En la bibliografía algunos autores denomina a esta situación como *caos transitorio*. En contraste, una trayectoria caótica de un sistema ligado y conservativo en ausencia de fuerzas externas permanecerá siempre siendo caótica, a pesar de estar cerca en ocasiones de otra trayectoria con dinámica regular.

2.5 Indicadores de caos

De una forma genérica, se denomina caótica a una trayectoria si su dinámica presenta extrema sensibilidad a las condiciones iniciales. El comportamiento caótico

es una consecuencia de la no linealidad de las ecuaciones del movimiento.

Para saber si un sistema presenta caos y caracterizarlo, tenemos una serie de indicadores, que nos ayudarán a determinar y analizar nuestro sistema. Algunos de los más conocidos son:

Superficie de sección de Poincaré

La superficie de sección de Poincaré (SSP) es una transformación simpléctica que resulta especialmente interesante en sistemas conservativos de dos grados de libertad. Básicamente, la SSP es un mapa de un plano del espacio de fases en sí mismo fijando una variable. En un sistema de 2 grados de libertad donde además se conserve la energía, las trayectorias estarán contenidas en una hipersuperficie de dimensión 3 (hay tres variables independientes), por lo que, cada punto del espacio de fases está definido con solo tres coordenadas, por ejemplo (x, y, p_y), ya que la otra coordenada se puede expresar como

$$p_x = p_x(x, y, p_y; E). \tag{2.49}$$

La SSP se construye definiendo una superficie característica del sistema, por ejemplo $x = 0$, y la SSP representa el valor de las coordenadas (y, p_y), cada vez que una trayectoria corta la SSP en una determinada dirección ($p_x > 0$ o bien $p_x < 0$), como se muestra en la figura 2.3. En ocasiones se obtiene una mejor visualización del espacio de fases si se representan de forma conjunta las SSP de varias trayectorias, calculadas todas a la misma energía. A esta representación se le llama *superficie de sección compuesta de Poincaré.*

La SSP compuesta permite caracterizar la estructura del espacio de fases, ya que distingue de forma inequívoca las regiones con comportamiento caótico (que se presentan como una nube densa de puntos), de las regiones regulares (en los que las órbitas periódicas aparecen como un conjunto de puntos disconexos, mientras que las órbitas cuasiperiódicas se presentan como un conjunto de curvas cerradas alrededor de las anteriores).

Para ilustrar esto, mostramos la superficie de sección compuesta de Poincaré asociada para una partícula de masa $m = 1$ que se mueve bajo la acción del siguiente

potencial oscilatorio anarmónico bidimensional

$$V(x,y) = \frac{1}{2}(x^2+y^2) + x^2 y - \frac{1}{3}y^3, \tag{2.50}$$

que recibe el nombre Hénon-Heiles, en honor a sus autores [19].

Como se puede observar en la figura 2.4 (a), la SSP compuesta definida por $x = 0$ y $p_x > 0$ para $E = 1/36$ es altamente regular dado que está principalmente formada por conjuntos de curvas cerradas (toros invariantes). Por el contrario, la SSP mostrada en la figura 2.4 (d), que tiene una energía $E = 1/7$, tiene una dinámica eminente caótica, dado que esta formada por una gran nube de puntos disconexos. Por último, en las figuras 2.4 (b) y (c), que están asociadas a las energías $E = 1/16$ y $E = 1/10$, respectivamente, mostramos la transición entre ambos regímenes. Como se puede ver, a estas energías aparece una dinámica mixta en la que las islas de regularidad se van rompiendo y aparecen las nubes de puntos caóticas.

Exponente de Lyapunov

Este indicador de caos es probablemente el más conocido de todos, debido a que

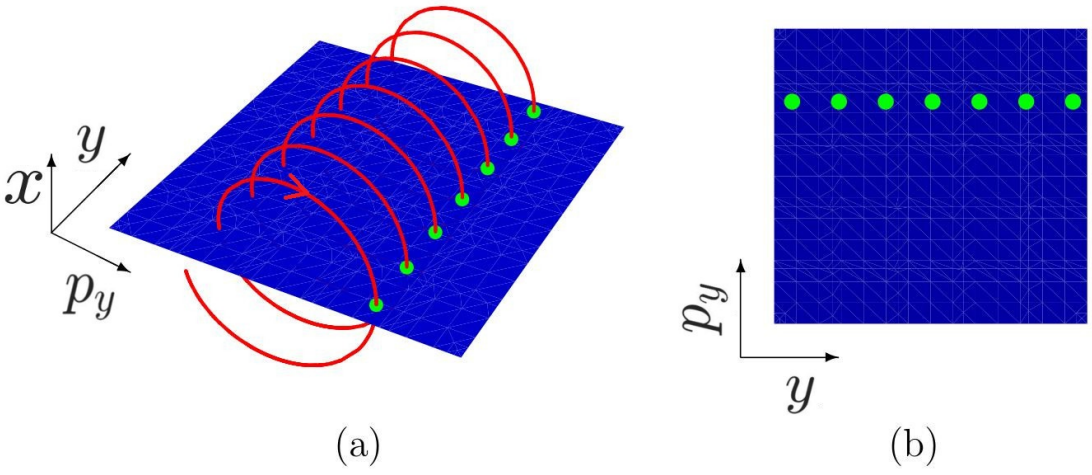


Figura 2.3: Definición de la superficie de sección de Poincaré. (a) En rojo, trayectoria del sistema. En verde, los puntos en los que la trayectoria atraviesa el plano que define la superficie de sección de Poincaré de color azul, definida por $\{x = 0, p_x < 0\}$. (b) Superficie de sección de Poincaré asociada a la trayectoria dibujada en el panel (a). Figura adaptada de la referencia [18].

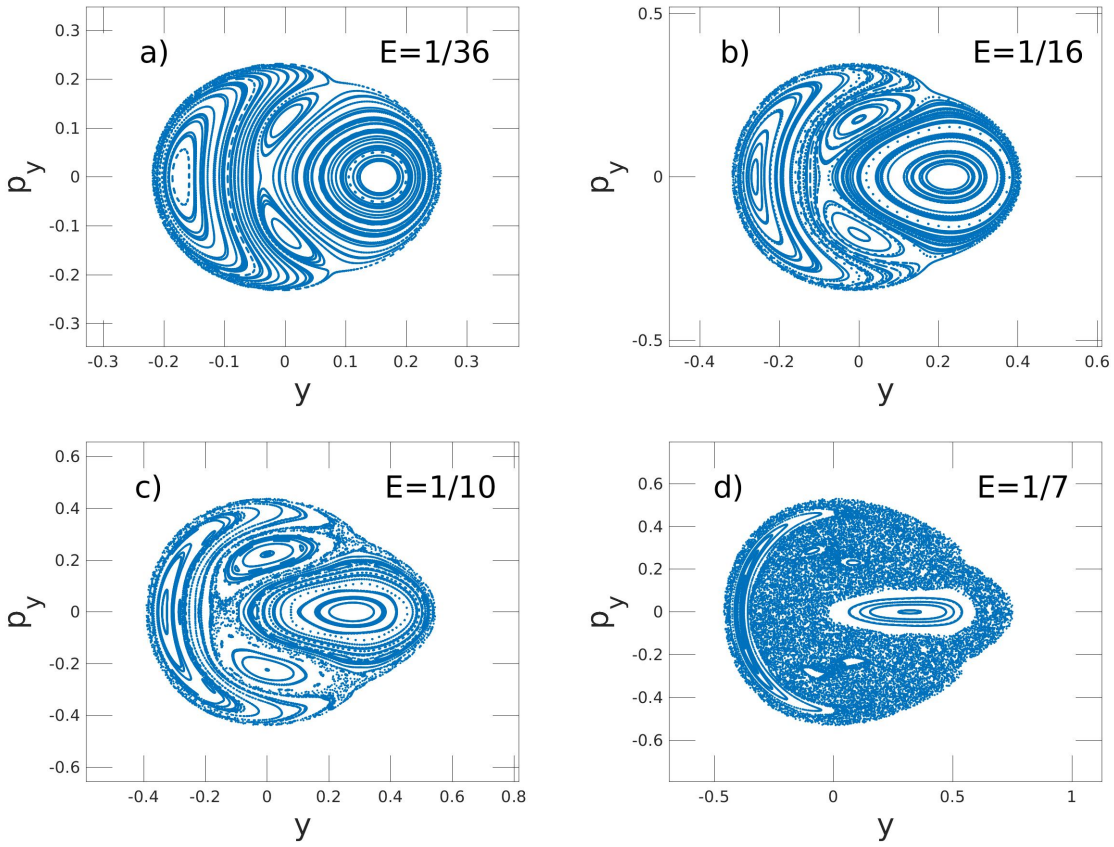


Figura 2.4: Superficie de sección de Poincaré compuesta para el sistema Hénon-Heiles, cuyo potencial viene descrito por la ecuación (2.50). Para las energías: a) 1/36, b) 1/16, c) 1/10 d) 1/7.

pone de relieve de forma directa la condición de sensibilidad extrema a las condiciones iniciales.

Usando la *notación simpléctica*, los puntos que definen una trayectoria se pueden representar con la ecuación (2.33) que es solución a las ecuaciones del movimiento del sistema, con condiciones iniciales $\mathbf{z}(0) = \mathbf{z_0}$. Si nos desplazamos un poco de las condiciones iniciales una distancia $\delta\mathbf{z_0}$, tendremos una trayectoria diferente separada una distancia de la original, dada por

$$d[\mathbf{z}_0, t] = \|\delta\mathbf{z}(t)\| = \|\mathbf{z}'(t) - \mathbf{z}(t)\|. \tag{2.51}$$

El exponente de Lyapunov asociado a la trayectoria definida por $\mathbf{z}_0$ se puede calcular

como

$$\bar{\lambda}[\mathbf{z}_0, \delta\mathbf{z}_0] = \lim_{\delta\mathbf{z}_0 \to 0} \frac{1}{t} \log \left\{ \frac{d[\mathbf{z}_0, t]}{\delta\mathbf{z}_0} \right\}, \tag{2.52}$$

y se puede estimar para un tiempo t lo suficientemente grande, pero no tanto como para alejarnos de la vecindad (régimen lineal) de la órbita de estudio.

Cuando este exponente es positivo, las trayectorias se alejan exponencialmente entre sí, lo que da lugar a una sensibilidad extrema a las condiciones iniciales, como sucede en la vecindad de las OPs inestables y con las trayectorias caóticas. Por el contrario cuando $\bar{\lambda} \leq 0$ no se da la sensibilidad anterior, ya que las trayectorias permanecen paralelas o se acercan, teniendo entonces lugar una dinámica regular [16].

Análisis de frecuencias

El método de análisis de frecuencias proviene del campo de análisis de señales, y se basa fundamentalmente en un análisis de Fourier. A este respecto, los sistemas dinámicos pueden ser analizados en el dominio del tiempo y de las frecuencias, ya que podemos pasar de uno a otro por medio de la transformada de Fourier. Una de sus ventajas principales es que puede aplicarse no solo a datos obtenidos de modelos o cálculos teóricos, sino que permite analizar también datos obtenidos experimentalmente, como por ejemplo los provenientes del campo de la biomedicina (ritmos cardiacos, electroencefalogramas, etc.). La idea es simplemente descomponer una señal dependiente del tiempo, $f(t)$, como una serie trigonométrica infinita

$$S(\omega) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} f(t) e^{2\pi i \omega t}\, dt, \tag{2.53}$$

cuya versión discreta se corresponde con

$$S_k = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{n=1}^{N} f_n e^{2\pi i k n/N}, \tag{2.54}$$

donde $f_n = f(n\Delta t/N)$ con $n = 1, \ldots, N$ siendo Δt el intervalo de muestreo de la señal, que debe garantizar las condiciones del Teorema de Nyquist-Shannon [20, 21]. A partir de $S(\omega)$ se define el correspondiente espectro de potencia $I(\omega) = |S(\omega)|^2$. El empleo de la versión discreta (2.54) es muy útil y popular, ya que permite el uso de técnicas numéricas de Transformada de Fourier Rápida o FFT (del inglés *Fast Fourier Transform*) que son altamente eficientes [22].

Una vez calculado el espectro de potencias, este puede utilizarse para concluir si una señal es periódica, cuasiperiódica o caótica. En los dos primeros casos el espectro consta de un número pequeño de picos bien definidos, mientras que en el tercero el espectro aparece como un distribucón ancha de frecuencias con multitud de picos cuyas amplitudes que varian de forma irregular, como se muestra en la figura 2.5. Este método fue aplicado por Noid, Koszykowski y Marcus [23] para el análisis de trayectorias en modelos moleculares y cálculo de los correspondientes espectros químicos de infrarrojo. Más recientemente, el método de análisis de frecuencias también se ha aplicado con éxito al estudio de la molécula LiCN [24]. En el caso de estas trayectorias, que derivan de un flujo hamiltoniano, la prescripción dada anteriormente sobre los espectros de potencia está garantizada por el teorema KAM, ya que en el caso regular las trayectorias tienen lugar en toros invariantes caracterizados por n frecuencias, mientras que en el caótico estos toros están destruidos en mayor o menor extensión. Por otra parte, indicaremos que el uso de las ecuaciones (2.53) o (2.54) solo implica el cambio de la señal $f(t)$ por la función de correlación $C(t) = \langle \mathbf{x}(0)\, \mathbf{x}(t) \rangle$, donde $\langle \ldots \rangle$ indica el promedio de trayectorias en el conjunto estadístico que se elija, por ejemplo, el microcánonico que describe situaciones a energía constante, el canónico que lo hace a temperatura constante, etc.

2.6 Descriptores lagrangianos

Los descriptores lagrangianos (DL) son una herramienta muy útil para desvelar las estructuras geométricas subyacentes en fujos dinámicos, lo que ofrece una valiosa información (cualitativa) sobre la estructura del correspondiente espacio de fases. Lo definieron por primera vez Jiménez y Mancho en 2009 [10] como la longitud de arco de una trayectoria en el espacio de fases de la siguiente manera. Dado un flujo (autónomo o no autónomo) $\dot{\mathbf{z}} = f(\mathbf{z}, t)$ en un espacio de N dimensiones, y para una trayectoria con una condición inicial $\mathbf{z}_0$ a un tiempo fijo t_0, si fijamos un lapso de tiempo $\tau > 0$,

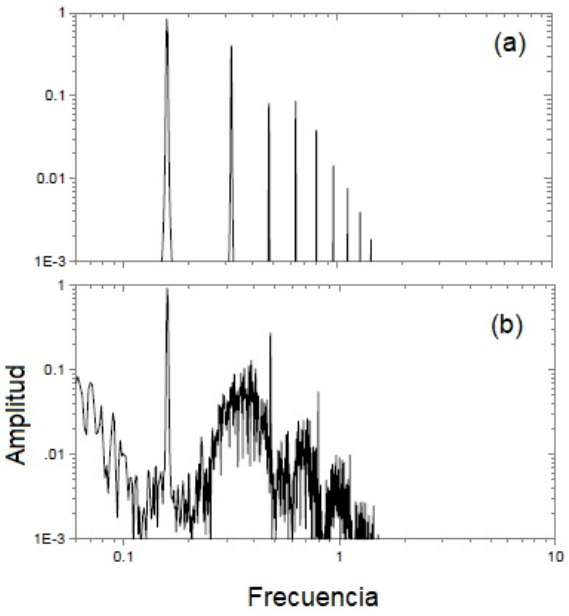


Figura 2.5: Comparación de los espectros de potencia obtenidos por FFT de (a) una señal periódica y (b) una señal caótica. Figura tomada de la referencia [25].

los DL $M_\tau(\mathbf{z}_0, t_0)$ vienen definidos como

$$M_\tau(\mathbf{z}_0, t_0) = \int_{t_0-\tau}^{t_0+\tau} \sqrt{\sum_{i=1}^{N} |\dot{z}_i(\mathbf{z}_0, t)|^2}\, dt. \tag{2.55}$$

La razón de integrar hacia adelante y hacia atrás de inicial es capturar simultáneamente la influencia de las variedades estables e inestables que puedan existir en su vecindad. Una dificultad práctica que puede encontrarse al calcular los DL ocurre cuando uno de los límites en la integral de (2.55) corresponde a un movimiento muy lento, como por ejemplo en la vecindad de un punto fijo parabólico o en sistemas abiertos. Una solución a elegante a este problema fue dada por Carlo y Borondo [26] en su tratamiento de los LD en mapas abiertos. Los DL se han usado casi exclusivamente para determinar la estructura las regiones caóticas del espacio de fases [27]. Para ello se construye un mapa que asigna un valor del DL en cada punto del espacio de fases para un valor determinado de τ. En los sistemas con dos grados de libertad se suele hacer este mapa en cada punto de la SSP. Sin embargo,

en el capítulo 6 estudiamos de qué forma los DL aportan también valiosa información sobre las trayectorias regulares.

Posteriormente, este indicador fue redefinido [28] de forma más general introduciendo en la definición original una norma $\hat{p}$ como

$$M_\tau(\mathbf{z}_0, t_0) = \int_{t_0-\tau}^{t_0+\tau} \sum_{i=1}^{N} |\dot{z}_i(\mathbf{z}_0, t)|^{\hat{p}}\, dt, \quad 0 < \hat{p} \leq 1. \tag{2.56}$$

En la práctica resulta conveniente probar también diferentes valores de la norma $\hat{p}$ para obtener una mayor resolución en los mapas formados por los DL, ya que el valor óptimo de $\hat{p}$ es una propiedad local.

Esta herramienta, cuyo marco general de utilización puede encontrarse en las referencias [29], facilita enormemente la forma de visualizar el espacio de fases, ya que su cálculo implica solamente la propagación de las trayectorias del sistema unido al cómputo de la integral (2.56). Como consecuencia se ha utilizado profusamente en la literatura en una gran variedad de campos, y a continuación comentaremos algunos ejemplos que encontramos más ilustrativos y/o significativos.

Un buen ejemplo es el mapa construido con DL en la vecindad de un punto hiperbólico en la referencia [30]. Estos autores estudiaron el flujo (integrable analíticamente) correspondiente al Hamiltoniano para un punto de silla lineal dado por:

$$\begin{aligned} \dot{x} &= \lambda x \\ \dot{y} &= -\lambda y, \qquad \lambda > 0, \end{aligned} \tag{2.57}$$

obteniendo una expresión analítica para el DL, cuyo resultado se muestra en la figura 2.6(a). En el panel derecho de la misma se muestran los valores del DL a lo largo de la sección horizontal en $y = 0.5$ [línea en negro en el panel (a)], donde se observa que cuando se cruza la variedad estable que emana del origen la derivada del DL es singular. De hecho, estos autores demostraron que este es el caso también cuando se considera una línea (vertical) que corte a la correspondiente variedad inestable.

Otro interesante trabajo es la refencia [31] donde se reveló la estructura de flujos oceánicos aplicando el método de los DL a bases de datos de altimetría marina

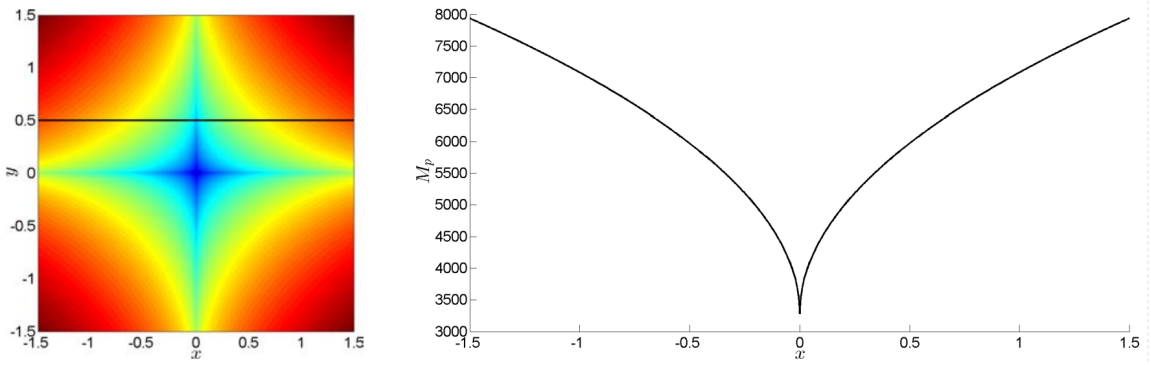


Figura 2.6: (a) Descriptores lagrangianos alrededor de un punto hiperbólico correspondientes al sistema (2.57) con $\lambda = 1$ obtenidos con $\hat{p} = 1$ y $\tau = 15$. Los colores azulados indican valores bajos y los rojizos altos. (b) Valores del descriptor a lo largo de la línea $y = 0.5$ [marcada en negro en el panel (a)], donde se observa que su derivada es singular en el punto correspondiente a la variedad estable que emana del origen. Figura tomada de la referencia [29].

obtenidos desde satélite. En la figura 2.7 se muestran algunos de sus resultados donde se observan perfectamente las variedades invariantes y las regiones de flujo hiperbólico y no-hiperbólico, y su evolución en el tiempo.

También, Wiggins et al. han contribuido al desarrollo de esta herramienta proponiendo métodos para calcular OPs y variedades invariantes normalmente hiperbólicas (NHIM) en las referencias [28, 32, 33].

Otro conjunto de aplicaciones interesantes de los DL que se ha descito en la literatura es en Física Molecular y Reactividad Química. Cabe mencionar aquí la investigación realizada en nuestro grupo por Revuelta, Benito y Borondo para la caracterización del espacio de fases del sistema molecular LiCN descrito mediante potenciales *ab initio* realistas [27], y el trabajo de Galen y Henandez [34, 35] sobre el cálculo de velocidades de reacción en modelos simplificados de un estado de transición genérico y de la reacción de isomerización de la cetena. Respecto a la primera de ellas presentamos en la figura 2.8 las SSP del sistema para varios valores de la energía, junto con su correspondiente mapa de DL. La molécula de LiCN presenta dos isómeros estables con configuraciones lineales: LiNC (el más estable) y el LiCN, y el correspondiente paso entre ellos a través de un estado de

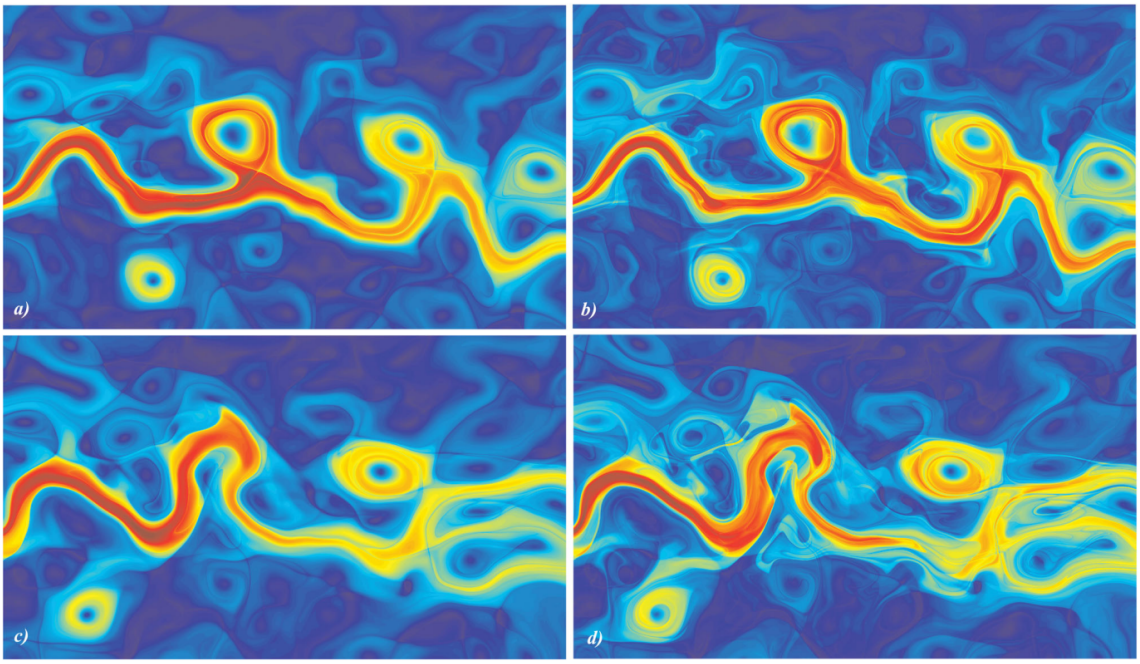


Figura 2.7: Descriptores lagrangianos en la corriente de Kuroshio entre las longitudes 148°E168°E y latitudes 30°N41.5°N; (a) y (b) en el 2 de Mayo de 2003; (c) y (d) en el 3 de Junio de 2003, calculados para $\hat{p} = 1/2$ y $\tau = 15$ [paneles (a) y (c)], y $\tau = 30$ [paneles (b) y (d)]. Figura tomada de la referencia [31].

transición que se situa en la vecindad punto de silla en la superficie de potencial. Desde el punto de vista dinámico, esta molécula presenta tres movimientos de vibración, que aproximadamente coinciden con la tensión del enlace C-N, la del Li respecto del centro del masas del fragmento CN, y por último la flexión del ángulo Li-C-N. De ellos, el último es un movimiento de gran amplitud, de forma que explora zonas amplias de la superficie de energía potencial, fuera de la zona armónica. Como consecuencia se acopla muy fuertemente con la flexión Li-CN, dando lugar a un caos generalizado a valores modestos de la energía de excitación. Estas características se visualizan eficazmente a través de SSP compuestas utilizando el camino de miníma energía que conecta los dos isómeros como superfice de sección en el espacio formado por la coordenada angular y su momento, (ψ, P_ψ). Así, las SSPs en las figuras 2.8(a)-(c) muestran las zonas de movimiento regular, cadenas de islas y caos en la dinámica de esta molécula. Lógicamente, estas también aparecen

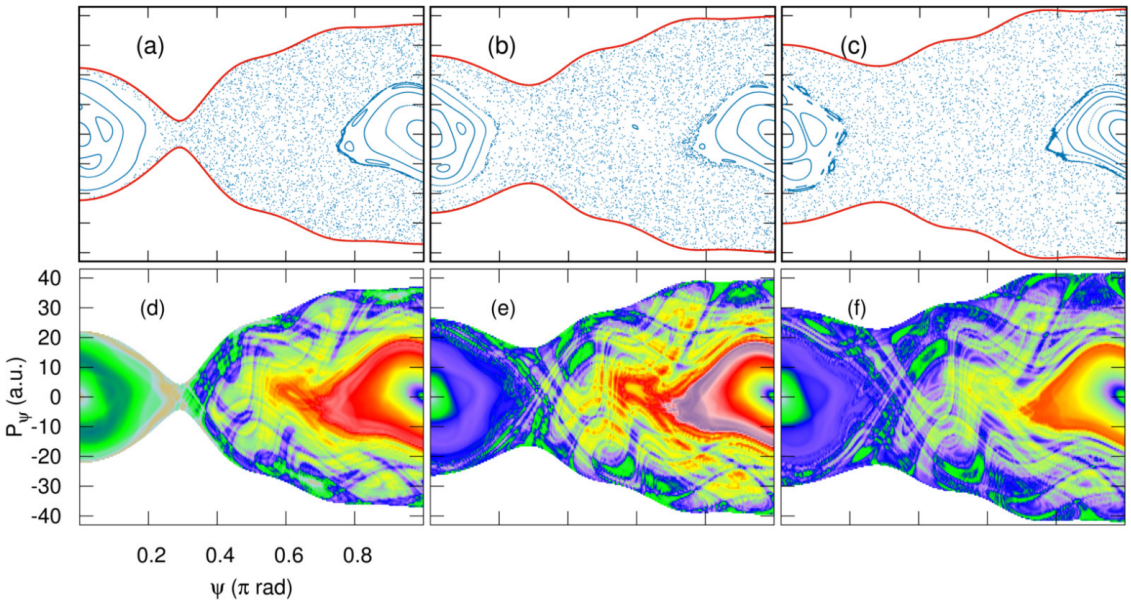


Figura 2.8: (a)-(c) Superficies de sección de Poincaré compuestas y (d)-(f) correspondiente descriptores lagrangianos para la molécula de LiCN para diferentes valores de la energía vibracional: (a)-(d) $E = 3500$ cm^{-1}, (b)-(e) $E = 4000$ cm^{-1} y (c)-(f) $E = 5000$ cm^{-1}, calculados para $\hat{p} = 0.4$ y $\tau = 2 \cdot 10^4$ u.a. Ver más detalles en el texto. Figura tomada de la referencia [27].

claramente en los correspondientes mapas de DL de las figuras 2.8(d)-(f), pero lo que resulta más sorprendente es ver cómo estos mapas revelan de forma muy detallada las estructuras subyacentes que existen en la zona caótica, de forma análoga a como ya vimos para el flujo oceánico en la figura 2.7. Creemos que los tres casos que acabamos de discutir demuestran claramente la potencia y utilidad de los DL como herramienta en dinámica no lineal.

2.7 Condición de cuantización semiclásica de Bohr-Sommerfeld

La mecánica semiclásica tuvo y todavía tiene un papel fundamental a la hora de establecer la relación entre la mecánica clásica y la cuántica [36, 37]. Los métodos semiclásicos se pueden aplicar cuando se aproximan entre sí los observables clásicos

y cuánticos al hacer $\hbar \to 0$, y han permitido explicar, entre otras cosas, los niveles de energía de átomos muy excitados, las propiedades estadísticas de autovalores de sistemas caóticos o diversas propiedades de la función zeta de Riemann [38].

La representación de una partícula de masa m en mecánica cuántica se hace a través de la función de onda $\psi(\mathbf{q}, t)$, cuya evolución en el tiempo viene dada por la ecuación de Schrödinger [39]

$$\hat{\mathcal{H}}\psi = i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t}, \tag{2.58}$$

donde $\hbar$ es la constante de Planck reducida $\hbar = h/(2\pi)$ y $\hat{\mathcal{H}}$ en el operador hamiltoniano, que lo podemos expresar como

$$\hat{\mathcal{H}} = -\frac{\hbar^2}{2m}\hat{\Delta} + \hat{V}, \tag{2.59}$$

siendo $\hat{\Delta} = \sum_j \partial^2/\partial q_j^2$ el operador laplaciano que da cuenta de la energía cinética y $\hat{V}$ el operador energía potencial.

Si el operador energía potencial $\hat{V}$ no depende del tiempo, se puede plantear además la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo

$$\hat{\mathcal{H}}\psi_n = \mathcal{E}_n\psi_n, \tag{2.60}$$

que es una ecuación de autovalores y autovectores. En ella, $\mathcal{E}_n$ son las autoenergías de la partícula, y las funciones ψ_n que resuelven la ecuación (2.60) se les denomina *autofunciones*, *autovectores* o *autoestados* del hamiltoniano $\hat{\mathcal{H}}$ asociados a la autoenergía $\mathcal{E}_n$. Los valores de las autoenergías para sistemas ligados son discretos, siendo esta una de las principales diferencias entre la mecánica clásica y cuántica.

A la hora de resolver la ecuación de Schrödinger, tanto dependiente (2.58) como independiente del tiempo (2.60), hay que tener en cuenta que este es un problema complicado, especialmente cuando aumenta el número de grados de libertad del sistema, su complejidad dinámica o presenta una densidad de estados alta, llegando a ser en ocasiones computacionalmente inviable con los medios de hoy en día. En estas situaciones una alternativa interesante para obtener los autovalores del sistema es utilizar la cuantización semiclásica, que también brinda una exclente perspectiva sobre la correspondencia entra los resultados de la mecánica cuántica

y de la mecánica clásica. En 1917, Albert Eintein publicó el único artículo de su carrera sobre cuantización [40]. En él señala una de las ideas más importantes de Poincaré, la invariabilidad de la cantidad $\sum p_i dq_i$ bajo cambios de coordenadas, siendo por tanto una buena magnitud para cuantizar. Por extensión, la cantidad $\int \sum p_i dq_i \equiv \int \mathbf{p} \cdot d\mathbf{q}$ que corresponde a la acción clásica, también es un invariante adiabático del movimiento cuando se perturba el Hamiltoniano lentamente. Además, Einstein observó que para el caso de movimientos regulares, quasiperiódicos en general, la acción debe cuantizarse en los correspondietes N-toros invariantes, siendo N el número de grados de libertad. La regla de cuantización propuesta por Einstein fue

$$\oint_{C_i} \mathbf{p} \cdot d\mathbf{q} = n_i h, \quad n_i = 0, 1, 2, \ldots, \quad i = 0, 1, 2, ..., N, \tag{2.61}$$

donde C_i son los N caminos cerrados topológicamente independientes que definen el toro, h es la constante de Planck y n_i son los números cuánticos que definen los correspondientes niveles de energía.

Con el desarrollo de la mecánica cuántica moderna, Keller en 1958 obtuvo, mediante el uso de la función de onda, su regla de cuantización (sin conocer la regla propuesta por Einstein)

$$\mathbf{k} \oint_{C_i} \nabla \mathcal{S} \cdot d\mathbf{q} = 2\pi n_i + \frac{\pi}{2} m_i, \tag{2.62}$$

donde $\mathbf{k}$ es un vector de ondas, y aparece un nuevo término en el lado derecho que también es proporcional a un número entero m_i. A partir de este resultado, la regla (2.62) se conoce como condición de cuantización EBK *(Einstein-Brioullin-Keller)*.

La condición de cuantización de Bohr-Sommerfeld es un caso particular de la EBK, que originariamente se definió para sistemas con un solo grado de libertad pero que es también válida para sistemas separables, y por tanto, a casos particulares como las OPs de un sistema. En este caso, la acción se puede cuantizar a lo largo de la correspondiente trayectoria. Esta condición establece así mismo la relación matemática que tiene que cumplir la acción clásica $\mathcal{S}$ de una órbita para ser aceptable cuánticamente, y, por extensión, su energía $\mathcal{E}_n$.

En el caso de las OPs, son semiclásicamente posibles aquellas cuya fase acumulada en un periodo de tiempo es múltiplo de 2π, lo que se conoce como condición de

cuantización de Bohr-Sommerfeld (BS)

$$\frac{S}{\hbar} - \mu\frac{\pi}{2} = 2\pi n, \quad n = 0, 1, 2, ... \tag{2.63}$$

donde S es la acción de la OP en un periodo T

$$S = \oint p dq \tag{2.64}$$

y μ es la fase topológica (descrita en la sección 2.4.1), que permite generalizar el método para más de un grado de libertad [17].

Capítulo 3

Gotas caminantes

La complejidad de los procesos de interacción entre fluidos y objetos macroscópicos da lugar a una serie de fascinantes fenómenos físicos, como los experimentos que realizaron por primera vez Yves Couder y su grupo [41]. En estos, y otros experimentos similares [42], se deja caer una gota de aceite sobre el mismo líquido contenido en una cubeta en vibración vertical [43–45]. Si la aceleración vertical de la cubeta es la apropiada, la gota, denominada gota caminante (GC), no penetra en el fluido y se desplaza al rebotar contra la superficie [44, 46] a causa de los impactos con las ondas generadas por ella misma en los anteriores rebotes.

El montaje experimental consiste en un agitador que sostiene a la cubeta haciéndola vibrar verticalmente, además, arriba de la cubeta y a uno de sus lados están situadas unas cámaras que graban a la gota y la superficie del fluido. Para facilitar la detección de la forma de la superficie, en el lado opuesto a la cámara lateral hay una luz (normalmente roja). El esquema del montaje experimental lo podemos ver en la figura 3.1.

Debido a la viscosidad del fluido, las ondas generadas en su superficie en cada rebote tardan un tiempo en decaer completamente. Esto hace que la GC se vea afectada por las ondas que ha generado previamente, y que todavía no se han desvanecido debido a la existencia en la superficie de una especie de *memoria* del sistema. Dicha memoria es la responsable de la compleja dinámica de la GC, y propicia algunos exóticos comportamientos que antes se habían considerado exclusivos

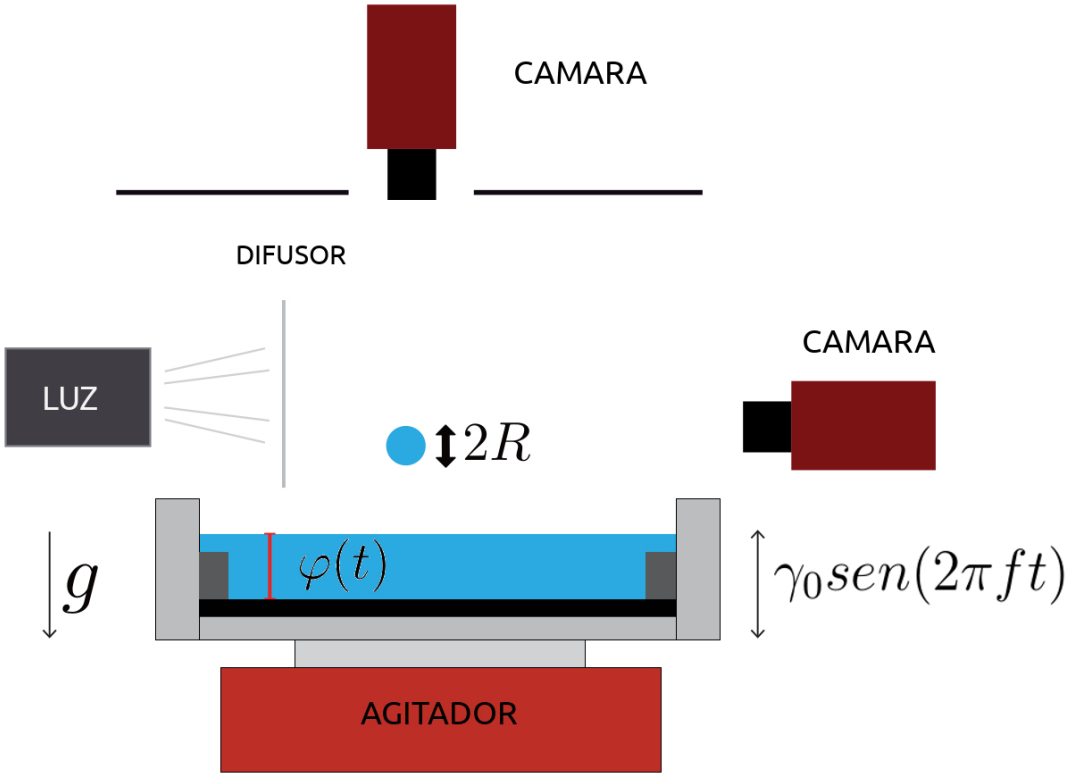


Figura 3.1: Esquema del montaje experimental del sistema gotas caminantes. (Figura adaptada de la referencia [47]).

de la mecánica cuántica [48].

Los experimentos de Couder y Fort han demostrado cómo cuando la GC atraviesa zonas con obstáculos sumergidos se provocan fenómenos similares al de barreras de energía [49], exhibiendo un comportamiento totalmente análogo al efecto túnel de la mecánica cuántica. En experimentos del mismo carácter (con obstáculos sumergidos) se ha simulado (haciendo pasar la GC entre dos obstáculos sumergidos) el experimento de difracción por una rendija, siendo el patrón de difracción obtenido totalmente análogo al que se observa al usar fotones [49].

Más recientemente, en el Massachusetts Institute of Technology, Bush y sus colaboradores han llevado estos experimentos un paso más allá. Demostraron la existencia de la dinámica caótica que presentan las GCs confinadas en recintos con una determinada geometría [50]. Observaron que las GCs presentan un comportamiento

estadístico con una media similar a las autofunciones del correspondiente sistema cuántico, de igual forma que hacen los electrones en un corral cuántico [51].

Fort et al. [52], por un lado, y Harris y Bush [53], por otro, han demostrado que las GCs en una cubeta en rotación se organizan en órbitas cuyos radios están distribuidos de forma discreta, de igual forma que ocurre con los niveles de Landau para los electrones en la mecánica cuántica [54]. Perrard et al. [55] han demostrado que cuando se induce un potencial de oscilador armónico ocurre una cuantización en los radios y los momentos medios de la GC. En los dos experimentos anteriores se ha observado también que la dinámica es caótica cuando aumenta la vibración de la cubeta, en amplitud o en frecuencia y en consecuencia la memoria, presentando los mismos fenómenos de cuantización anteriores aunque solo estadísticamente [53].

Un aspecto importante de los experimentos anteriores es que son los primeros que han conseguido un sistema experimental de onda-piloto (una partícula guiada por una onda que ella misma genera) en el sentido en el que Louis de Broglie vislumbró como un modelo completo de la mecánica cuántica [56, 57]. De Broglie propuso que la partícula estaba guiada por una onda generada por su vibración interna. Mientras que esta postura da una visión intuitiva de algunos fenómenos, el origen físico de esta vibración estaba sin especificar. En 1952, Bohm propuso una teoría de onda-piloto alternativa [58, 59] en la que la partícula estaba guiada por una onda, pero no la generaba ella sino que, simplemente, esa onda estaba postulada como la solución de la ecuación de Schrödinger. La mecánica bohmiana da resultados matemáticamente equivalentes a los de la mecánica cuántica estándar, motivo por el que fue criticada, ya que su propuesta solo añadía complicaciones adicionales a la formulación estándar sin aportar resultados nuevos. La teoría de la onda-piloto fue finalmente rechazada por la interpretación de Copenhague, donde se niega la existencia de trayectorias bien definidas, al igual que una ecuación del movimiento autoconsistente, y se postula la idea de un universo intrínsecamente probabilístico.

Desde entonces, muchos han sido los esfuerzos para restaurar el determinismo en la interpretación de la mecánica cuántica, razón por la que los experimentos de GCs han generado tanto interés, ya que pueden proporcionar inspiración para la creación de una mecánica cuántica determinista [60,61]. No obstante, debido a la gran complejidad de

la dinámica de las GCs, no existe por el momento un modelo teórico completo en esta dirección. Hasta la fecha, las investigaciones en este campo han sido principalmente experimentales, a falta de un modelo realista del sistema [44, 52, 62]. Por este último motivo, la modelización de los experimentos anteriores es un problema aún abierto, y parte de la investigación teórica que se realiza es proponer modelos que sean capaces de reproducir algún aspecto concreto de los mismos.

3.1 Estados de vibración de las gotas caminantes

La superficie del fluido contenido en la cubeta, que se encuentra vibrando verticalmente con una aceleración

$$\gamma(t) = \gamma_0 \sin(2\pi f t), \tag{3.1}$$

donde f es la frecuencia de la oscilación y γ_0 es su amplitud[1], se vuelve inestable y genera un patrón de ondas subarmónicas cuando la aceleración aumenta más allá del umbral de Faraday $\gamma_0 > \gamma_F$ [63, 64]. Por debajo de este umbral, la GC puede permanecer rebotando indefinidamente sobre la superficie del fluido debido a la pequeña capa de aire que se interpone entre él y el fluido en cada rebote [64]. La coalescencia se dará solo para aceleraciones inferiores al umbral de *rebotar* γ_B, mientras que permanecerá rebotando para $\gamma_0 > \gamma_B$ [43]. En este último caso, el movimiento vertical de la GC será diferente para cada valor de γ_0, y cada estado de *rebotar* puede ser etiquetado como (m_n, n), donde m_n/f es el periodo total del movimiento en el que la GC rebota un número n de veces [65].

Justo por encima del umbral de rebote, la GC rebota con el mismo periodo que el de oscilación del baño en un estado (1,1). Si la amplitud de la vibración del baño aumenta, hay una bifurcación y el estado pasará al (2,2). Si la amplitud aumenta todavía más, para determinados tamaños de la GC, encontraremos estados

[1] Al final del capítulo se incluye un glosario o tabla resumen 3.1 con todas las constantes que se usan a lo largo del capítulo.

(2,1), lo que significa que la GC golpea la superficie cuando la cubeta ha oscilado 2 veces, situación en la que el movimiento vertical de la GC estaría en resonancia con los subarmónicos de Faraday. Como consecuencia de ello, la amplitud de las ondas estacionarias en la superficie del fluido aumenta significativamente con cada rebote, como observaron experimentalmente Protière et al. [44]. y Eddi et al. [66]. Los correspondientes modelos teóricos fueron desarrollados más tarde por Molácek y Bush [67] y Wind-Willassen et al. [68].

Cuando la amplitud de oscilación se aumenta aún más, por encima del umbral de *caminar* $\gamma_0 > \gamma_w$, la GC comienza a desplazarse [66] debido al campo de ondas que se ha generado, lo que hace que la GC se mueva horizontalmente con un movimiento rectilíneo a velocidad constante [45] (en la sección 3.3 se caracterizará este estado), cuyo valor viene determinado por el balance entre la fuerza que le proporciona el campo de ondas, que es igual al gradiente de la superficie cambiado de signo, $-\nabla\varphi$, y la fuerza de rozamiento, que depende linealmente de la velocidad. Este balance de fuerzas fue discutido por primera vez por Protiére et al. [44]. Más tarde Molácek y Bush [46] incluyeron estas fuerzas en su modelo teórico dando expresiones explícitas para las mismas, es decir, para el rozamiento y el campo de ondas en función de los parámetros del fluido.

Cuando el sistema se compone de una sola GC, el estado (2,1) es el caso más sencillo de modelizar debido a que solo es importante el campo de ondas en la vecindad del punto donde rebota. Por el contrario, un sistema con varias GCs es más complejo porque hay que tener bien definida la onda y su propagación en puntos lejanos de los rebotes de cada GC.

Aunque la onda se pueda aproximar bien por una superposición lineal de ondas (como veremos al describir su dinámica en la sección 3.4), el acoplamiento entre el movimiento vertical de la GC y el campo de ondas es un problema complejo y no lineal, y es todavía objeto de estudio en la literatura.

3.2 Dinámica vertical

Mientras la aceleración de la cubeta se mantenga por encima del umbral de *rebotar* y por debajo del de *caminar* $\gamma_B < \gamma_0 < \gamma_w$ (en la figura 3.2 se puede ver la GC con su movimiento vertical, y con el horizontal cuando se supera el umbral de *caminar*), la GC permanecerá rebotando sobre la superficie en un punto; este comportamiento fue caracterizado experimentalmente por Protiére et al. [44] que presentaron un diagrama para una GC de aceite de 50 cSt, seguido por Eddi et al. [66] que lo hicieron con una GC en aceite 20 cSt. Durante estos rebotes, el baño nunca entra en contacto con la GC debido a la pequeña capa de aire que los separa [43].

Las GCs tienen un diámetro típicamente de 1 mm, por lo que la tensión superficial del fluido domina a la presión hidrostática que le proporciona a la superficie durante el impacto en cada rebote, Gilet y Bush [65, 70] estudiaron este fenómeno experimentalmente, y lo que observaron es que la superficie se deforma durante el impacto, proporcionándole a la GC una fuerza proporcional a la profundidad de la deformación de la superficie, como si se tratara de un resorte, siendo la constante

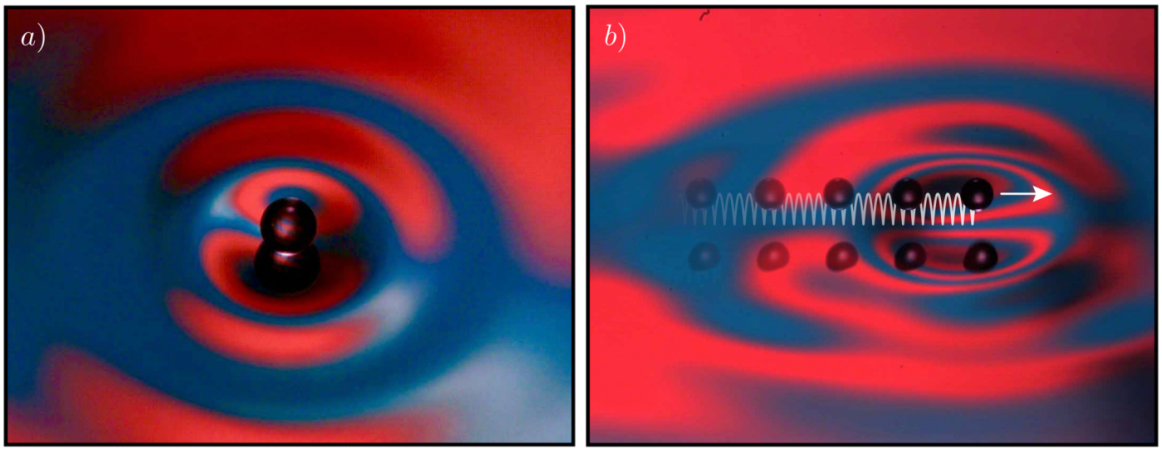


Figura 3.2: Transicion de rebotar a caminar. A medida que la aceleración vertical de la superficie del baño se acerca al umbral de *caminar*, γ_w, (a) la *gota caminante* se desestabiliza dando lugar a un movimiento lateral, transformándose en (b) un caminante. La transición *de rebotar a caminar* se puede obtener usando modelos de ondas relativamente simples, ya que solo es necesario caracterizar el campo de ondas en la vecindad de los rebotes. (Figura tomada de la referencia [69]).

elástica proporcional a la tensión superficial, σ.

Molácek y Bush [67] han investigado la interacción de la GCs con la superficie usando el modelo de resorte lineal. Considerando una GC de masa m rebotando sobre la superficie de un fluido en una cubeta en aceleración vertical (3.1), y suponiendo que la superficie actúa como un campo de ondas cuya altura justo en el punto de impacto viene dada por la función $\varphi(t)$, la altura efectiva de la superficie será la combinación entre el campo de ondas y la vibración de la cubeta, $a(t) = -\frac{\gamma_0}{\omega^2}\sin(\omega t) + \varphi(t)$. Haciendo el cambio de coordenadas en el que la superficie justo debajo de la GC se mantiene estacionaria y denotando la altura de la GC como $Z(t)$, de forma que el origen $Z = 0$ se define como el punto en el que el centro de masas de la GC se encuentra a un radio R sobre la superficie en equilibrio, Molácek y Bush [67] llegaron al siguiente modelo de resorte lineal

$$m\frac{d^2Z}{dt^2} + H(-Z)\left(D\frac{dZ}{dt} + CZ\right) = -mg^*(t), \tag{3.2}$$

donde $g^*(t) = g + \dfrac{d^2a}{dt^2}$ es la gravedad efectiva que aparece al hacer el cambio de sistema de referencia, H es la función escalón de Heaviside, D es el parámetro de fricción efectiva y C es la constante elástica del *resorte*. Los valores de los parámetros anteriores tienen que ser medidos experimentalmente. Cabe esperar que el modelo no sea válido cuando las fuerzas inerciales comienzan a ser lo suficientemente grandes comparadas con la tensión superficial $\rho RV^2/\sigma >> 1$, donde ρ es la densidad del fluido, R es el radio de la gota y V es la velocidad de impacto. Un modelo alternativo ha sido propuesto por Terwagne et al. [71], en el que describe el sistema como dos masas también unidas por un resorte, siendo capaces de describir las bifurcaciones entre modos de vibración observadas experimentalmente.

El modelo lineal de resorte funciona bien para reproducir ciertos modos de vibración que se dan en los experimentos, pero, para algunos casos, Molácek y Bush [67] encontraron valores de C y de D que no eran realistas, lo que llevó a los autores a proponer un nuevo modelo de *resorte logarítmico* [72], que reprodujo los resultados experimentales más satisfactoriamente. Este último modelo ha sido también usado por otros autores como Galeano-Rios et al. [73].

El modelo más reciente para reproducir la interacción entre la GC y la superficie lo han propuesto Galeano-Rios et al. [74]. Dichos autores modelizan el impacto de la GC usando las ecuaciones de Navier-Stokes para el movimiento de una partícula esférica sobre una superficie libre, cuya área de contacto cambia con el tiempo. Con este modelo consiguieron reproducir la dinámica vertical sin usar parámetros de ajuste, obteniendo toda la serie de transiciones entre estados que habían observado Wind-Willassen et al. [68].

La descripción del movimiento vertical necesita de una definición de la forma de la superficie para ser completa. La dinámica descrita en esta sección es válida para casos concretos en los que la GC no está en resonancia con la vibración de la cubeta, dado que las ondas generadas tienen una amplitud lo suficientemente pequeña como para no afectar a la dinámica de la GC. Para las GCs que están en resonancia o en estado de *caminar* es necesario modelizar la onda $\varphi(t)$ como hacemos en la sección 3.4.

3.3 Dinámica horizontal

Consideremos una GC de masa m rebotando periódicamente al doble del periodo de vibración de la cubeta. Asumimos que la longitud de onda de Faraday de las ondas que se generan es mucho más grande que el tamaño de la GC, y consideramos la GC como una partícula puntual cuya posición es $\mathbf{r}_p(t) = (x_p(t), y_p(t))$ sobre la superficie del fluido. El movimiento horizontal de la GC está impulsado por la fuerza que le proporciona la onda, y está frenado por las fuerzas de rozamiento durante el vuelo y las generadas durante la interacción. Este balance de fuerzas fue modelizado por primera vez Protiére el al. [44] a través de la siguiente ecuación de trayectoria monodimensional

$$m\ddot{x}_p + f^V \dot{x}_p = F^b \sin\left(\frac{2\pi \dot{x}_p}{V_F}\right), \tag{3.3}$$

donde el segundo término de la izquierda es disipativo y el de la derecha da cuenta de la interacción con la superficie. La ecuación (3.3) describe la dinámica de una forma estroboscópica, lo que significa que promedia las fuerzas sobre cada periodo vertical

de la GC. Se asume que la fricción principal proviene de la pequeña capa de aire que se interpone entre la GC y el fluido durante el impacto, y este término se aproxima por $f^V \sim (\mu_G s/h_f)(\tau/T_F)$, donde μ_G y h_f son, respectivamente, la densidad del aire y el grosor de la capa, s es aproximadamente el área de contacto, y T_F es el periodo con el que oscila la cubeta. Por otra parte, la fuerza efectiva que actúa sobre la GC debido a la pendiente de la onda en el punto en el que impacta es $F^b \sim m\gamma_0(A/\lambda_F)(\tau/T_F)$, donde A es la amplitud de la onda generada, τ es el tiempo de contacto entre la GC y la superficie del fluido y λ_F es la longitud de onda de Faraday. Protiére et al. estimaron que la inclinación de la superficie en el punto de impacto es función de la relación entre la velocidad de la GC y la de propagación de la onda V_F, en cuyo caso la fuerza ejercida por el campo de ondas generado es porporcional a $\sin\left(\frac{2\pi\dot{x}_p}{V_F}\right)$. Este modelo captura un comportamiento clave del sistema, que es la transición *de rebotar a caminar*, debido a que la amplitud de la onda depende de la aceleración de la oscilación vertical de la cubeta, $F^b = F^b(\gamma_0)$. Este modelo, sin embargo, no tiene en cuenta el pasado de la GC, lo que impide que se vea afectada por sus anteriores rebotes y que reproduzca comportamientos más complejos como los patrones de interferencia, el movimiento caótico [75], etc. como los que se dan en los experimentos.

La dinámica horizontal de la GC fue estudiada también por Shirokoff [62], que incluye en las ecuaciones del movimiento una fuerza de rozamiento y la fuerza que le aporta el campo de ondas, que es directamente proporcional al gradiente de la superficie. Este modelo asume que el impacto debe ser tratado como instantáneo y la onda está modelizada por una *ecuación de ondas capilaridad-gravedad linearizada*. El problema que tiene este tratamiento es que la onda no depende de la aceleración de la cubeta y, como consecuencia, el modelo tiene muchos parámetros de ajuste cuyos valores no coinciden con los experimentales.

La ecuación de la trayectoria fue revisada posteriormente por Molácek y Bush [46]. Ellos encontraron que los factores que dominan la fuerza de rozamiento son la transferencia de momento entre el fluido y la GC durante el impacto, y el rozamiento del aire durante el vuelo. La fuerza horizontal es proporcional al gradiente de la superficie en el punto de impacto, $\nabla\varphi(\mathbf{r}_p, t)$. La ecuación de trayectoria puede

escribirse entonces como

$$m\ddot{\mathbf{r}}_p + D(t)\dot{\mathbf{r}}_p = -F(t)\nabla\varphi(\mathbf{r}_p, t), \tag{3.4}$$

donde $D(t) = C\sqrt{\rho R/\sigma}F(t) + 6\pi R\mu_G$ es una fricción que depende del tiempo cuyo primer término corresponde al intercambio de momento entre la GC y la superficie del fluido en el momento del impacto, y el segundo corresponde al rozamiento del aire durante el vuelo. Por otro lado, $F(t)$ es la fuerza normal a la superficie, con la que la GC impacta, que se puede calcular con alguno de los modelos de la sección 3.2 como

$$F(t) = m\ddot{Z} + mg^*. \tag{3.5}$$

Molácek y Bush [46] pusieron de relieve que, puesto que la GC bota indefinidamente, es necesario que exista un balance entre las fuerzas verticales a las que está sometido, de forma que su peso se compense en promedio con la fuerza $F(t)$, de manera que $\int_0^{T_F} F(\tau)d\tau = mgT_F$. Finalmente promediando toda la trayectoria en el periodo entre rebotes, la ecuación (3.4) se transforma en

$$m\ddot{\mathbf{r}}_p + \bar{D}(t)\dot{\mathbf{r}}_p = -\overline{F(t)\nabla\varphi(\mathbf{r}_p, t)}, \tag{3.6}$$

donde $\bar{D} = \dfrac{1}{T_F}\displaystyle\int_0^{T_F} D(t)dt = Cmg\sqrt{\rho R/\sigma} + 6\pi R\mu_G$, siendo C un parámetro de ajuste que está en consonancia con los experimentos siempre que su valor sea $0.17 < C < 0.33$ [46]. Una vez que $F(t)$ es conocido, la dinámica vertical se puede eliminar, y solo considerar el movimiento horizontal de la GC, motivo por el que a este tipo de modelos se les denominan *estroboscópicos* lo que experimentalmente equivale a considerar la posición de la GC solamente cuando está en su punto más alto.

3.4 Modelos de onda piloto

La forma de la superficie deformada por el impacto de una esfera sobre un fluido ha sido estudiada experimentalmente por Eddi et al. [48], mostrando que se genera una onda capilar que desencadena a su paso un patrón de ondas estacionarias. Estas observaciones han motivado que la descripción teórica de la onda que existe en los

problemas de la GC sea una suma de ondas estacionarias generadas en cada punto en el que impacta la esfera.

Tanto para la descripción del movimiento vertical como del horizontal se necesita una adecuada descripción del campo de ondas o forma de la superficie del líquido, $\varphi(\mathbf{r}_p, t)$. Se han propuesto muchos modelos para ello, y la transición *de rebotar a caminar* en todos ellos asume que el estado de la GC es el (2,1) y que, por tanto, los modos de vibración de la superficie que se excitan son los subarmónicos de Faraday.

Guiados por las observaciones experimentales, Eddi et al. [48] propusieron un modelo fenomenológico para la onda, en el que suponen que en cada punto donde golpea la GC se crea una onda circular con número de onda de Faraday k_F. La ecuación de la superficie en la posición $\mathbf{r}_p$ después de N impactos se puede escribir entonces como una superposición de todas las ondas anteriores centradas en las posiciones $\mathbf{r}_n$, $n \in (-\infty, N-1)$

$$\varphi(\mathbf{r}_p, t_N) = \sum_{n=-\infty}^{N-1} \frac{\mathring{A} e^{-\frac{|\mathbf{r}_p - \mathbf{r}_n|}{\delta}}}{|\mathbf{r}_p - \mathbf{r}_n|^{1/2}} e^{-\frac{t_N - t_n}{\tau}} \cos(k_F |\mathbf{r}_p - \mathbf{r}_n| + \theta). \tag{3.7}$$

La ondas decaen exponencialmente en el espacio, escalando con una longitud característica δ (que se tiene que medir experimentalmente), y temporalmente con el tiempo característico $\tau = M_e T_F$, donde M_e es el parámetro de memoria del sistema. M_e se puede entender como el número de rebotes del pasado que afectan de forma relevante a la onda actual, por no haber decaído de forma significativa. Este parámetro depende de la aceleración vertical de la cubeta siempre que nos mantengamos por debajo del umbral de Faraday, $M_e \propto (1 - \gamma_0/\gamma_F)^{-1}$. La amplitud $\mathring{A}$ en la ecuación (3.7) es un parámetro libre del sistema que debe ajustarse experimentalmente. Un aspecto fundamental en este modelo es que la función $\varphi(\mathbf{r}_p, t_N)$ tiene una singularidad en el origen, por lo que la ecuación (3.7) no puede ser utilizada para modelizar la transición *de rebotar a caminar*. Aun así, este modelo tiene una gran importancia, ya que introduce el concepto de memoria, es decir, de cómo el pasado de la GC afecta a su presente, lo que será algo esencial en los desarrollos teóricos posteriores.

La ecuación (3.7) fue usada por Fort [76] para crear un mapa iterativo, en el que

el intercambio de momento entre la GC y el fluido en cada impacto se calcula en cada paso con la velocidad de la onda y la pendiente de la superficie líquida en el punto de impacto. Este modelo ha permitido reproducir muchos de los fenómenos que se observan en los experimentos, como son la difracción de partículas a través de una rendija [49], o las órbitas en un sistema en rotación [52] y en un potencial de oscilador armónico [55] (véanse las referencias [77, 78] para más detalles).

Una descripción más precisa de la forma de la onda $\varphi(\mathbf{r}_p, t_N)$ la obtuvieron Molácek y Bush [46] en base a resultados experimentales. Estos investigadores acoplaron el modelo de la dinámica vertical de la onda con su amplitud, como en el modelo anterior, y expresaron la onda como combinación lineal de las ondas centradas en cada punto donde la GC ha impactado, pero considerando esta vez que en cada rebote se deforma la superficie de manera que esta adquiere la forma de una función de Bessel de primer orden

$$\varphi(\mathbf{r}_p, t) = \sum_{n=-\infty}^{\lfloor t/T_F \rfloor} \frac{\widetilde{A}S}{\sqrt{t - nT_F}} \cos\left(\frac{\omega t}{2}\right) e^{\frac{t-nT_F}{\tau}} J_0(k_F|\mathbf{r}_p - \mathbf{r}_n|). \tag{3.8}$$

La ecuación (3.8) no contiene ningún término exponencial de decaimiento espacial, debido a que dicho decaimiento ya viene dado por la propia función de Bessel J_0. Una ventaja de la ecuación (3.8) frente a la expresión (3.7) es que la nueva ecuación no presenta singularidad en el origen, lo que permite caracterizar la transición *de rebotar a caminar*. La amplitud $\widetilde{A}$ es un parámetro característico del sistema. El parámetro más importante es la memoria M_e que, en este caso, se calcula como

$$M_e = \frac{T_d}{T_F(1 - \gamma_0/\gamma_F)}, \tag{3.9}$$

que es directamente proporcional al periodo de rebote T_d, e inversamente proporcional a T_F y al cociente γ_0/γ_F. La ecuación (3.9) presenta una singularidad para $\gamma_0 \to \gamma_F$ lo que nos indica el límite donde es válido el modelo de superposición lineal de ondas para describir estados de alta memoria. S es el primer coeficiente de la expansión en serie de Taylor de $F(t)$ dividido entre el peso de la GC

$$S = \frac{\int_0^{T_F} F(\tau)\sin(\omega\tau/2)d\tau}{\int_0^{T_F} F(\tau)d\tau}, \tag{3.10}$$

donde $F(t)$, que viene dado por la ecuación (3.5), es la fuerza vertical, normal a la superficie. Finalmente, el parámetro S da cuenta de la efectividad de la GC a la hora de generar ondas.

La naturaleza discreta de los modelos anteriores hace que las ecuaciones de trayectoria sean intratables analíticamente más allá de la transición *de rebotar a caminar*. Por ello la ecuación (3.8) fue transformada por Oza et al. en una ecuación integro-diferencial [75] para su tratamiento numérico. Para ello se asumió que la escala de tiempo del movimiento vertical es mucho más pequeña que la escala de tiempo del movimiento horizontal. En el modelo de trayectoria continua, la onda viene dada entonces por

$$\varphi(\mathbf{r}_p, t) = \frac{AS}{T_F} \cos\left(\frac{\omega t}{2}\right) \int_{-\infty}^{t} J_0(k_F|\mathbf{r}_p - \mathbf{r}_n(s)|) e^{\frac{-(t-s)}{\tau}} ds, \tag{3.11}$$

donde se ha sustituido el sumatorio de la ecuación (3.8) por una integral, y el término $\frac{1}{\sqrt{t - nT_F}}$ por T_F^{-1}. Introduciendo esta descripción para la superficie de ondas en las ecuaciones del movimiento horizontal, se obtiene la ecuación de trayectoria que más fenómenos observados en los experimentos ha reproducido hasta el momento. Este modelo se denomina *estroboscópico*, ya que todas las fuerzas que actúan sobre el movimiento horizontal de la GC están promediadas sobre el periodo del movimiento vertical de la GC. En este modelo estroboscópico, los términos que hacen referencia a la fase de oscilación de la cubeta Φ en el momento del impacto fueron introducidos por Oza et al. [75] como un producto constante $\sin\Phi = 2SC \approx 0.3$.

La ecuación (3.11) sirvió no solo para describir la transición *de rebotar a caminar*, sino que, además, Oza et al. [75] obtuvieron una expresión analítica para relacionar la velocidad asintótica de una GC libre en función de la vibración de la cubeta. También obtuvieron una expresión analítica para las órbitas circulares en una cubeta en rotación [52, 53, 79] y en un potencial de oscilador armónico [55, 80–83]. Por otra parte, ha sido el primer modelo teórico que ha descrito una transición al caos (como se ve que ocurre en los experimentos) en el movimiento de las GCs [84].

Después del modelo estroboscópico se ha intentado reproducir como se comportan varias GCs simultáneamente rebotando sobre la misma superficie e interaccionando entre ellos. Oza et al. [85] investigaron el movimiento de dos GCs con una

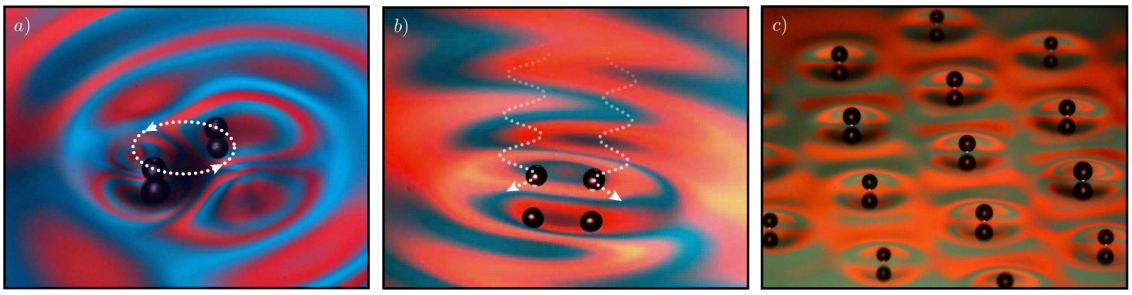


Figura 3.3: Cuando interactúan varias *gotas caminantes*, sus movimientos pueden estabilizarse en estados cuantizados como (a) pares orbitando, (b) pares en movimiento, y (c) estructuras en red. Para modelizar la dinámica de gotas enlazadas, es necesario considerar el decaimiento espacio-temporal en los modelos de ondas. (Figura tomada de la referencia [69]).

vibración algo mayor del umbral de *caminar* γ_w, observando, tanto teórica como experimentalmente, que ambos quedan orbitando en unos radios cuantizados, como se puede ver en la figura 3.3.

El campo de ondas introducido por Molácek y Bush es insuficiente para reproducir el comportamiento de varias GCs debido a que el decaimiento espacial de las funciones de Bessel no es suficientemente fuerte. Consecuentemente, Oza et al. [75] añadieron un decaimiento espacial extra, obteniendo la siguiente ecuación integral

$$\varphi(\mathbf{r}_p, t) = \frac{A}{T_F} \int_{-\infty}^{t} J_0(k_F|\mathbf{r}_p - \mathbf{r}_n(s)|) e^{\frac{-(t-s)}{\tau}} e^{-\frac{\alpha|\mathbf{r}_p - \mathbf{r}_n(s)|^2}{t-s-T_F}} ds, \tag{3.12}$$

donde α es un factor que controla el decaimiento espacial. Damiano et al. [86] encontraron que este decaimiento hace que la ecuación proporcione una excelente descripción de los resultados experimentales. Además, aunque la aproximación de considerar $\sin\Phi$ constante es suficiente para describir el movimiento de una sola GC, esta tiene limitaciones a la hora de reproducir la dinámica de varias GCs, ya que, en ese caso, aparecen modulaciones de la dinámica vertical que complican el modelo. La importancia de estas modulaciones para modelizar un par de GCs en una órbita hizo que Oza el al. [85] planteasen una relación lineal entre la fase $\sin\Phi$ y la fuerza efectiva. Esta relación fue $\Gamma_{eff} = \gamma_0/\gamma_F - p\varphi_c$, donde p es un parámetro a ajustar experimentalmente y φ_c es la amplitud local producida por ambas GCs. Incluir el amortiguamiento espacio-temporal fue clave para entender la estabilidad de

las órbitas a diferentes radios. Arbelaiz et al. [87] se vieron obligados a considerar distintas modulaciones para la fase, pero esta vez le dieron una dependencia de la forma $\Gamma_{eff} = \gamma_0/\gamma_F - \widetilde{p}\widetilde{\varphi}_c$, donde $\widetilde{p}$ es otro parámetro a ajustar, y $\widetilde{\varphi}_c$ en este caso es la componente de la onda producida por la otra GC. Un estudio detallado de la dependencia de la onda de la dinámica vertical del un par de GCs ha sido realizado por Couchman et al. [88], que caracterizaron también las inestabilidades y oscilaciones de los enlaces entre GCs.

Un inconveniente del modelo estroboscópico es que está derivado a partir de un modelo de ondas estacionarias. Esto ha sido justificado principalmente por Molácek y Bush [46] quienes han mostrado que las ondas con número de onda cercano al de Faraday k_F son las que tienen un decaimiento menor, de forma que la onda resultante puede aproximarse por una suma de ondas estacionarias monocromáticas. Sin embargo, existen modos de vibración subdominantes con diferentes números de onda, donde la onda total debería escribirse como suma de ondas desfasadas y con diferente número de ondas.

Es posible añadir diferentes números de onda al modelo estroboscópico, y esto será objeto de futuros trabajos y parte de esta Tesis. En el capítulo 5 proponemos una relación nueva entre la longitud de la onda total y la energía. Veremos cómo esto tiene una gran importancia en la relación que existe entre el modelo GCs y la mecánica cuántica.

Por otra parte, Milewski et al. [89] introdujeron otro modelo para la onda-piloto. Acoplaron el modelo del resorte logarítmico y un modelo de viscosidad baja para la onda, y describieron la velocidad del fluido con el gradiente $\mathbf{u} = -\nabla\phi$. Linealizando las ecuaciones de Navier-Stokes con baja viscosidad, se obtiene el siguiente sistema de ecuaciones para la onda $\varphi(\mathbf{r}_p, t)$

$$\nabla^2\phi = 0, \quad \text{para} \quad z \leq 0, \tag{3.13}$$

$$\phi \to 0, \quad \text{cuando} \quad z \to -\infty, \tag{3.14}$$

$$\phi_t = -g(t)\varphi + \frac{\sigma}{\rho}\nabla^2\varphi + \nu_e\nabla^2\phi - \frac{1}{\rho}P_D, \quad \text{si} \quad z = 0, \tag{3.15}$$

$$\varphi_t = \phi_z + \nu_e\nabla^2\varphi, \quad \text{si} \quad z = 0. \tag{3.16}$$

Aquí, la GC está acoplada a la evolución de la onda mediante el término de presión $P_D = P_D(\mathbf{r}_p - \mathbf{r}_n(t), t)$, que se hace cero cuando la GC no está en contacto con el baño. Este modelo consigue reproducir muchos comportamientos de los experimentos, y tiene la ventaja de que no necesita suponer el estado de *rebotar* $(2, 1)$. Además, al no necesitar aproximar la dinámica vertical se pueden reproducir comportamientos más complejos.

Desafortunadamente, la resolución las ecuaciones de Navier-Stokes es muy costoso computacionalmente. Durey y Milewky [83] derivaron un modelo discreto en el tiempo asumiendo que la interacción entre la GC y el baño es instantánea. En su modelo suponen que la dinámica vertical es el estado $(2, 1)$. El modelo fue muy efectivo para reproducir las trayectorias regulares y caóticas de la GC bajo el efecto de un potencial armónico, el comportamiento estadístico a tiempos largos y las estabilidad de los enlaces entre GCs.

3.5 Condiciones de contorno

En los modelos presentados en la sección 3.4 se ha supuesto que no es necesario considerar condiciones de contorno para las ondas. No obstante, en algunos fenómenos de interés sí es necesario incluirlas, en particular cuando se quiere tener en cuenta el efecto del borde de la cubeta o cuando hay cambios abruptos en la profundidad de la misma debido a la existencia de obstáculos sumergidos [90–92], como sucede, por ejemplo, en los experimentos de difracción a través de una o dos rendijas [49, 93, 94].

Couder y Fort [49] fueron los primeros en estudiar numéricamente los efectos que produce en las trayectorias el sumergir obstáculos en el líquido. Para ello, emplearon la ecuación de trayectoria de Protiére et al. [44] en el contexto de las difracciones por una o dos rendijas. Estos autores modelizaron los obstáculos como fuentes secundarias

de ondas tal manera que la interferencia de ondas anule la amplitud de la onda total en ellos, imponiendo una condición de contorno de Dirichlet.

Por otra parte, Gilet y Blanchette [95] estudiaron el movimiento de GCs en corrales. Trataron los obstáculos, de nuevo, como condiciones de contorno. En sus estudios las ondas se descomponen en una suma de autofunciones del laplaciano en el dominio de interés. Gilet impuso condiciones de contorno de von Neumann mientras que Blanchette impuso la condición de Dirichlet. Se han propuesto otros métodos similares a los de Gilet [96, 97] y Blanchette [98], como el de Dubertrand et al. [99] (usando la función de Green) que imponen, también, condiciones de contorno de von Neumann y Dirichet. Aproximar las condiciones de contorno hace que los modelos no puedan reproducir ciertos comportamientos experimentales.

Nachbin et al. [92] estudiaron el efecto túnel considerando obstáculos sumergidos en el baño centrándose en siatemas de un solo grado de libertad. Su objetivo fue el de reproducir los resultados experimentales de decaimiento exponencial de la probabilidad de encontrar a la GC más allá de la barrera [91]. Faria [100] adaptó el modelo propuesto por Milewki et al. [89] para obtener la forma de la superficie. En este caso se usaron las ecuaciones de Navier-Stokes, aproximando la función $\phi_s(\mathbf{r}_p, 0, t)$ por

$$\phi_z(\mathbf{r}_p, 0, t) = -\nabla \cdot [b(\mathbf{r}_p)\nabla\phi(\mathbf{r}_p, 0, t)], \tag{3.17}$$

donde $b(\mathbf{r}_p)$ se escoge para hacer coincidir la relación de dispersión en todas las zonas del baño. Milewki et al. redujeron las ecuaciones del movimiento a dos ecuaciones diferenciales para la forma de la onda, $\varphi(\mathbf{r}_p, t)$, y el potencial de velocidad $\phi_s(\mathbf{r}_p, 0, t)$, obteniendo

$$\phi_t = -g(t)\varphi + \frac{\sigma}{\rho}\nabla^2\varphi + \nu_e\nabla^2\phi - \frac{1}{\rho}P_D, \tag{3.18}$$

$$\varphi_t = -\nabla \cdot [b(\mathbf{r}_p)\nabla\phi] + \nu_e\nabla^2\varphi, \tag{3.19}$$

donde se asume que la interacción entre la onda y el baño es instantánea.

3.6 Marco general del sistema onda piloto

En esta sección se presenta el modelo más general de onda-piloto, que debe ser adaptado para cada caso dependiendo de lo que se pretenda simular. Este modelo explora la dinámica de las trayectorias a pesar de que no reproduzca completamente todos los experimentos. Además, en ocasiones no todos los resultados de las simulaciones son accesibles para la GC, es decir, los modelos teóricos predicen comportamientos que no se encuentran en los experimentos.

El modelo general tiene dos aspectos fundamentales responsables de las analogías que presenta el sistema con la mecánica cuántica. El primero es que el campo de ondas es monocromático (esto será un tema clave a tratar en esta Tesis). El segundo es que la GC estará en un estado de resonancia con la vibración de la cubeta. En su versión adimensionalizada, el modelo general mide las longitudes en unidades de k_F y los tiempos en unidades de $M_e T_F$, y viene dado por

$$\kappa \ddot{\mathbf{r}}_p + \dot{\mathbf{r}}_p = -\beta C(t) \nabla \varphi[\mathbf{r}_p(t), t], \tag{3.20}$$

donde

$$\varphi(\mathbf{r}_p(t), t) = \int_{-\infty}^{t} S(s, \Gamma) J_0(|\mathbf{r}_p(t) - \mathbf{r}_n(s)|) e^{-\frac{\hat{\alpha}|\mathbf{r}_p - \mathbf{r}_n(s)|^2}{t-s+M_e^{-1}}} e^{-(t-s)} ds, \tag{3.21}$$

En estas dos últimas ecuaciones, los parámetros de fase son

$$S = S(t, \Gamma), \tag{3.22}$$

$$C = C(t, \Gamma). \tag{3.23}$$

Al escribir las ecuaciones de esta forma, κ se puede interpretar como una masa adimensional, mientras que β mide el *peso* de la interacción entre la GC y la superficie, y los parámetros de fase, S y C, dependen de la aceleración adimensionalizada del baño, $\Gamma = \gamma_0/\gamma_F$. El pilar central del modelo se resume en que la GC genera una onda con la forma de una función de Bessel monocromática en el punto de impacto. Esta onda decae en el tiempo y en el espacio. La onda total que afecta a la GC es una superposición lineal de todas las ondas generadas con anterioridad.

Las ecuaciones anteriores son para la partícula libre. Se pueden añadir términos para estudiar el efecto de fuerzas externas, como una fuerza conservativa (dada por el gradiente del campo potencial, $\mathbf{F}_{ext} = -\nabla V(\mathbf{r}_p)$), como por ejemplo, una fuerza de Coriolis [79, 84, 101] o una fuerza Coulombiana [84], con lo que la ecuación (3.20) se transforma en

$$\kappa\ddot{\mathbf{r}}_p + \dot{\mathbf{r}}_p = -\beta C(t)\nabla\varphi[\mathbf{r}_p(t), t] - \nabla V(\mathbf{r}_p). \tag{3.24}$$

Bush [102] propuso otro marco más reducido que también es capaz de reproducir ciertos aspectos de los experimentos. En su modelo simplificado hace constante la fase de oscilación del baño en el momento del impacto. El decaimiento espacio-temporal en la ecuación (3.21) lo aproxima a la unidad, aproximación que es buena si se pretende modelizar una sola GC. Con estas aproximaciones se obtiene la siguiente dependencia de κ y β con la aceleración del baño, la memoria M_e y los parámetros del fluido [103]

$$\kappa = \frac{m}{\bar{D}T_F M_e}, \quad \beta = \frac{mgAk_F^2 T_F M_e^2}{\bar{D}}. \tag{3.25}$$

Llegados a este punto queremos resaltar que, a pesar de que κ y β estan relacionados, en esta Tesis se van a considerar como parámetros independientes, para así poder explorar todos los regímenes dinámicos posibles.

La anterior simplificación nos proporciona un caso especialmente interesante, en el que Oza et al. [104] encontraron un comportamiento propio de la mecánica cuántica: GCs atrapadas en órbitas circulares por su propia onda, simulando estados de espín. Este fenómeno, que ya se observó en los experimentos [105], nos recuerda otro objetivo interesante del planteamiento de estos modelos: inspirar o entender la posibilidad de un modelo determinista de la mecánica cuántica.

En este marco general, a pesar de que el término de decaimiento espacio-temporal de la onda no sea significativo en su influencia en GCs individuales, este se puede entender como una distribución gaussiana en el espacio, cuya anchura varía en el tiempo, y se puede expresar también en función de los parámetros del sistema

$$e^{-\hat{\alpha}r^2/(t+M_e^{-1})}, \quad \text{con} \quad \hat{\alpha} = \frac{\alpha}{k_F^2 T_F M_e}. \tag{3.26}$$

De esta forma, el decaimiento es específico para cada sistema y función de las propiedades del fluido.

Los parámetros de fase tienen un significado sutil; físicamente representan el acoplamiento entre la GC y la superficie del baño. Couchman et al. [88] proponen que para una sola GC en el estado de *caminar*, S se mantiene constante, mientras que C se puede aproximar por una función lineal de Γ y de la amplitud local de la onda $\widetilde{\varphi} = \varphi(\mathbf{r}_p(t), t)$. Para una GC aislada, el producto $\sin\Phi = 2SC$ está acotado entre 0.1 y 0.4, valor que explica el éxito del modelo estroboscópico, en el que $\sin\Phi = 0.5$ [46]. Por tanto se espera que la introducción de modulaciones de fase debe tener un efecto insignificante en la dinámica de una sola GC. Sin embargo, ambos parámetros se hacen dependientes del tiempo cuando interactúan múltiples GCs [85, 87].

La progresión que han tenido los modelos teóricos sobre este sistema hidrodinámico, sugieren una gran cantidad de nuevas direcciones a explorar para llegar a generalizar el marco teórico del sistema onda-piloto.

3.7 Modelo de baja memoria

Para la dinámica vertical de la GC la situación es la siguiente: cuando una pequeña GC impacta verticalmente en la superficie, se perturba su equilibrio inestable, creando así dos tipos de ondas. La primera, que se debe al impacto inicial, se desvanece rápidamente, mientras que la segunda, que es más longeva, corresponde a una onda de Faraday. Esta situación corresponde al estado (2,1) descrito en la sección 3.1. Cuando la GC golpea por segunda vez la superficie del baño, impacta en una onda que no ha decaído todavía del todo, por lo que impulsa de nuevo a la GC verticalmente hacia arriba. El rebote, responsable de la supervivencia de la onda, puede continuar repitiéndose una y otra vez de forma que, cuando se ilumina estroboscópicamente de forma adecuada, se observa como que la partícula levita. Esto es posible ya que la superficie del fluido está aportando energía a las GCs. Hay otro umbral, $\gamma_W < \gamma_F$, en el que la GC deja de moverse solo verticalmente y comienza a caminar (transición *de rebotar a caminar*). Todos los detalles de estos procesos están bien documentados en la sección 3.1, y en las referencias [67, 102, 106].

Para estudiar la trayectoria de la GC de forma estroboscópica vamos a suponer

que el movimiento vertical y el horizontal están desacoplados. La correspondiente ecuación de movimiento bidimensional es la ecuación donde la fase de oscilación de la cubeta cuando la GC la golpea es siempre la misma, y el rozamiento es independiente del tiempo e igual a la unidad, se trasforma en

$$\kappa_0(1-\Gamma)\ddot{\mathbf{r}}_p(t) + \dot{\mathbf{r}}_p(t) = -\frac{2}{(1-\Gamma)^2}\nabla\varphi(\mathbf{r}_p(t),t), \tag{3.27}$$

donde $\mathbf{r}_p(t) = (x_p(t), y_p(t))$ da la posición de la partícula y $\varphi(\mathbf{r}_p(t),t)$ representa la altura de la superficie en un punto específico. También κ_0 es una constante que resume todos los parámetros que caracterizan al fluido, y $0 \leq \Gamma(\gamma_0) \leq 1$ es proporcional al grado de memoria, como se puede ver en la ecuación (3.9). Además, se hace una aproximación estroboscópica que tiene en cuenta todas las ondas de Faraday generadas hasta ese momento, $\varphi(\mathbf{r}(t),t)$ [75]. Una de las ventajas fundamentales de esta formulación es que permite la inclusión de la fuerza conservativa derivada de un potencial externo, $V(\mathbf{r}_p(t))$, como se ha hecho en la ecuación (3.24).

Vamos a simplificar la ecuación (3.27) para el caso de baja memoria. En realidad, utilizaremos la aproximación de Rayleigh para la fuerza/fricción de la onda, desarrollada por Labousse y Perrard en la referencia [107], en la que solamente se tiene en cuenta la última onda generada. En este caso, la altura viene dada por la función Bessel de orden cero

$$\varphi \approx \varphi_0\ J_0[k_F|\mathbf{r}_p(t) - \mathbf{r}_n(t-T_F)|], \tag{3.28}$$

donde φ_0 es la amplitud del campo. La fuerza $\mathbf{F}_p$ que ejerce la onda está relacionada con la pendiente local del campo, y se puede obtener como el gradiente de φ, dando lugar a

$$\mathbf{F}_p = \gamma_0\mathbf{v}\left(1 - \frac{v^2}{v_0^2}\right), \tag{3.29}$$

donde $\mathbf{v}$ es el vector de velocidad de la GC, $v_0 = [16\gamma_0/(C\varphi_0(k_F T_F)^3]^{1/2}$ es la velocidad media de la GC, que permanece constante en ausencia de campos externos y para ciertos potenciales (como el armónico), C es la constante de proporcionalidad de la fuerza de la onda, y γ_0 es la fricción efectiva calculada en la referencia [67]. De esta manera, finalmente se llega a la siguiente expresión para el movimiento de las GCs

bajo el efecto de un potencial externo

$$\frac{d\mathbf{v}}{dt} = -\nabla V(\mathbf{r}_p) - \frac{1}{T_v}\mathbf{v}\left(\frac{v^2}{v_0^2} - 1\right), \tag{3.30}$$

donde $T_v = m/\gamma_0$ es un tiempo característico. Nótese que en la ecuación (3.30), v_0 controla el término de fricción de Rayleigh, de forma que cuando la velocidad de la GC es mayor que v_0, se produce una desaceleración, mientras que cuando es menor tiene lugar una aceleración de la GC.

A continuación, a modo de esquema, se presentan dos tablas. En la tabla 3.1 mostramos un listado con todas las variables usadas en esta sección junto con su significado físico. En la tabla 3.2 se presentan brevemente los distintos modelos que se han propuesto junto con sus autores.

Tabla 3.1: Lista de constantes y variables que aparecen en los diferentes modelos del sistema de gotas caminantes.

Parámetro	**Descripción**
R, m	Radio y masa de la GC
ρ, σ, ν_e	Densidad del fluido, tensión superficial, viscosidad cinemática efectiva
g	Aceleración de la gravedad
$f, \omega = 2\pi f$	Frecuencia y frecuencia angular de las oscilaciones del baño
μ_a	Viscosidad dinámica del aire
$\gamma_0, \Gamma = \gamma_0/\gamma_F$	Amplitud de la oscilación del baño y su aceleración adimensional
$k_F, T_F = 4\pi/\omega$	Número de onda de Faraday y periodo de Faraday
$\bar{D} = Cmg\sqrt{\rho R/\sigma} + 6\pi R\mu_a$	Coeficiente de rozamiento
$S, C, \sin\Phi = 2CS$	Parámetros de fase
$\omega_D = \sqrt{\frac{\sigma}{\rho R^3}}$	Frecuencia natural de oscilación de la GC
$T_d = \nu_e k_F^2$	Tiempo de decaimiento característico
$Bo = \rho g R^2/\sigma$	Número de enlace
$Oh_e = \nu_e \rho(\sigma\rho R)^{-1/2}$	Oensorge number
$\Omega = 2\pi f\sqrt{\rho R^3/\sigma}$	Número de vibración
$M_e = \frac{T_d}{T_F(1-\omega/\omega_F)}$	Parámetro de memoria
$A = \sqrt{\frac{2\pi\nu_e T_F}{\pi}}\frac{mgk_f^3R^2}{\sigma(3k_f^2R^2-Bo)}$	Amplitud de la onda en el modelo estroboscópico
$\kappa = \frac{m}{\bar{D}T_F M_e}$	Masa adimensional
$\beta = \frac{mgAk_F^2T_F M_e^2}{\bar{D}}$	Coeficiente de memoria adimensional
$\alpha = \frac{\epsilon}{2\nu_e(1+2\epsilon^2)}$	Factor de decaimiento espacial
$\epsilon = \frac{Oh_e\Omega R k_F}{3k_F^2R^2+Bo}$	Viscosidad inducida por la corrección al número de onda
$T_v = \frac{m}{\gamma_0}$	Tiempo característico a baja memoria

Tabla 3.2: Resumen de los diferentes modelos del sistema de gotas caminantes ordenados por año de publicación.

Modelo (autores)	**Dinámica vertical**	**Modelo de ondas**	**Tiempo de simulación/real**
Modelo de memoria de camino (Fort et al. [52])	Dinámica horizontal desacoplada	Funciones de Bessel generadas en cada punto de impacto	$\mathcal{O}(1)$
Modelo hidrodinámico de onda piloto (Molácek y Bush [46])	Resorte logarítmico		$\mathcal{O}(1)$
Modelo de integral estroboscópica (Oza et al. [75])	Fase del bote constante	Funciones del Bessel a lo largo de la trayectoria con un decaimiento espacio-temporal	$\mathcal{O}(1)$
Modelo de fase variable (Couchman el al. [88])	Fase del bote variable		$\mathcal{O}(1)$
Modelo del oscilador de Rayleigh (Labousse y Perrald [107])	No hay dinámica vertical	Se modelan con un rozamiento no lineal de Rayleigh	$\mathcal{O}(10^{-3})$
Modelo de impulso (Bush et al. [108])			$\mathcal{O}(10^{-3})$
Onda piloto de Faraday (Milewky et al. [89])	Resorte logarítmico	Cuasi-potencial, viscosidad débil	$\mathcal{O}(10^{2})$
Modelo discreto de onda piloto de Faraday Durey M. [83])	Impactos discretos e interación instantánea		$\mathcal{O}(10^{-1})$

Capítulo 4

Dispersión elástica de átomos de helio por una superficie de cobre

En este capítulo se presenta una revisión de los estudios existentes sobre la dispersión elástica de átomos de helio por una superficie corrugada de cobre, centrándonos, fundamentalmente, en aquellos aspectos que son más relevantes para los resultados de esta Tesis Doctoral, que se presentan en el capítulo 7. Sin embargo, hay que destacar que todos los resultados que se presentan en este capítulo han sido recalculados por el autor, ya que el poder de cálculo actual permite una mayor resolución en los mismos. La geometría de un experimento típico de dispersión átomo-superficie se muestra en la figura 4.1. En el se lanza desde una fuente un haz monoenergético y colimado de átomos, que tras interaccionar con la superficie se dispersan, midiendose finalmente el ángulo de dispersión en un detector. En particular, expondremos cómo se modeliza y analiza un experimento de difracción de estas características. Para ello, en la sección 4.1 se describe la construcción de la función hamiltoniana del sistema y cómo se llevan a cabo las simulaciones numéricas. A continuación, en la sección 4.2 se analiza la estructura (fractal) de la función de dispersión del sistema. Por último, en la sección 4.3 se describe esta estructura en función de los cruces de las variedades invariantes de la órbita periódica inestable principal del sistema.

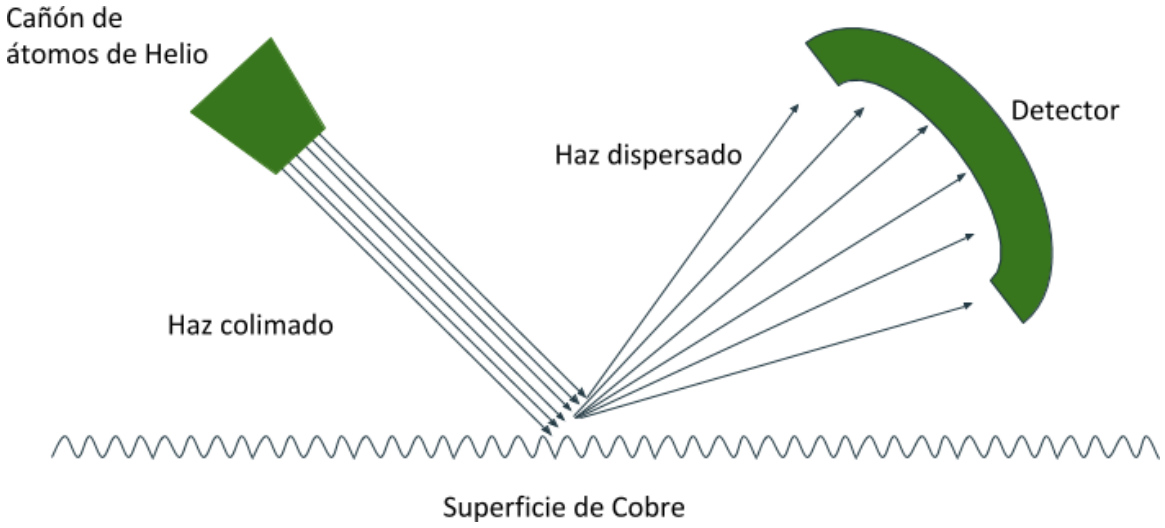


Figura 4.1: Representación esquemática de la geometría de un experimento de dispersión átomo-superficie.

4.1 Descripción del sistema

Una superficie metálica puede tener diferentes grados de corrugación dependiendo de cómo haya sido cortada. Como consecuencia de ello, al lanzar átomos de helio sobre una superficie de cobre, estos podrán *sentir* un potencial diferente para cada grado de corrugación de la misma. En esta sección describimos cómo se modeliza un sistema de este tipo. En la subsección 4.1.1 discutiremos el hamiltoniano, y en la subsección 4.1.2 el correspondiente potencial.

4.1.1 Modelo de dispersión átomo-superficie con dos grados de libertad

Para hacer un modelo apropiado del sistema de colisión He-Cu, vamos a tener en cuenta que una característica importante de los correspondientes experimentos es que la dispersión de los átomos en la dirección transversal es despreciable. Es decir, que toda la dinámica tendrá lugar en el plano definido por el movimiento asintótico del átomo de helio, que en nuestro caso supondremos que es el $x - z$, donde la primera coordenada es la dirección paralela a la superficie y la segunda es

la dirección perpendicular a la misma. Desde el punto de vista teórico esto es una ventaja considerable, ya que hace más fácil el estudio del sistema al reducirlo a uno de dos grados de libertad.

Por otra parte la temperatura de la superficie hace vibrar perpendicularmente a la misma, de forma que los átomos de helio al chocar con ella pueden ganar o perder energía, debido al intercambio de fonones durante la interacción. Sin embargo, si la temperatura es lo suficientemente baja (en rigor, 0 K) la dispersión es elástica y no hay intercambio de energía, por lo que el sistema puede suponerse conservativo, que es el caso que vamos a analizar en este capítulo.

La trayectorias de los átomos de helio se obtienen integrando numéricamente las ecuaciones de Hamilton (2.8), asociadas a la función

$$H = \frac{1}{2m}(p_x^2 + p_z^2) + U(x, z), \tag{4.1}$$

donde m es la masa del átomo de helio y $U(x, z)$ es el potencial que describe la interacción del átomo incidente con la superficie. Este potencial viene definido por una serie de parámetros que se obtienen experimentalmente. Los parámetros del potencial depende tanto de la corrugación de la superficie como de la 'penetración' de los átomos en la misma, es decir, de la energía con la que impactan en la superficie (ver subsección 4.1.2), y se puede separar en dos términos de la siguiente manera

$$U(x, z) = V_0(z) + V_c(x, z), \tag{4.2}$$

donde $V_0(z)$ es una función de Morse que depende exclusivamente de la coordenada z y $V_c(x, z)$ es una función que depende de la corrugación. Ambos términos dependen del tipo de superficie.

Las condiciones iniciales para la propagación de las trayectorias se eligen de la siguiente forma

$$\begin{aligned} z_0 &= z_{max}, \\ x_0 &= -z_{max} \tan\theta_i + b \cdot a, \\ p_{z_0} &= -\sqrt{2mE}\cos\theta_i, \\ p_{x_0} &= \sqrt{2mE}\sin\theta_i, \end{aligned}$$

donde E y θ_i son la energía y ángulo de incidencia respecto de la perpendicular a la superficie iniciales del átomo de helio, a es la longitud de la celdilla unidad o parámetro de red de la superficie, y b es un parámetro de impacto que toma valores entre 0 y 1 y nos da la posición relativa de los átomos con respecto a la celdilla unidad (ver figura 4.2). El valor z_{max} es una distancia suficientemente grande en la que consideramos que el efecto del potencial sobre el helio es despreciable, y que en esta Tesis se ha tomado igual a $z_{max} = 12$Å. De esta manera se modelizan los experimentos típicos del llamado "cañón de helio", en los que un haz colimado (aproximadamente) monoenergético se lanza con un ángulo de incidencia determinado sobre una superficie [109]. Hay que destacar que esta técnica experimental es estándar hoy en día para la caracterización de superficies metálicas.

Un esquema ilustrativo de los experimentos numéricos de dispersión átomo de helio-superficie de cobre, definiendo las correspondientes variables y parámetros, se muestra en la figura 4.2. En ella podemos ver unas condiciones iniciales para los átomos de helio que están repartidas homogéneamente en una celda unidad y a una distancia lo suficientemente alejada de la zona de interacción. Tras interaccionar con la superficie, se mide el ángulo de salida cuando los átomos cruzan de nuevo la línea $z = z_{max}$.

Las condiciones iniciales se definen en función del parámetro de impacto b principalmente porque así se barren todas las posibilidades dinámicas de interacción, debido al hecho de que la superficie de potencial (en x) es periódica.

En los experimentos típicos se miden las propiedades dinámicas finales de las partículas en la región asintótica [1]. Tanto para el estudio teórico como experimental de los sistemas de dispersión tiene especial interés la *función de dispersión*, o ángulo final del átomo de helio respecto de la dirección perpendicular a la superficie, que corresponde al observable del experimento y depende de las condiciones iniciales, como el parámetro de impacto. En nuestro caso la función de dispersión se calcula a partir de los valores de las dos componentes del momento del helio en la región

[1] Se denomina *región asintótica* a la zona con una separación perpendicular respecto de la superficie lo suficientemente grande como para que se pueda despreciar el efecto del potencial en esa región.

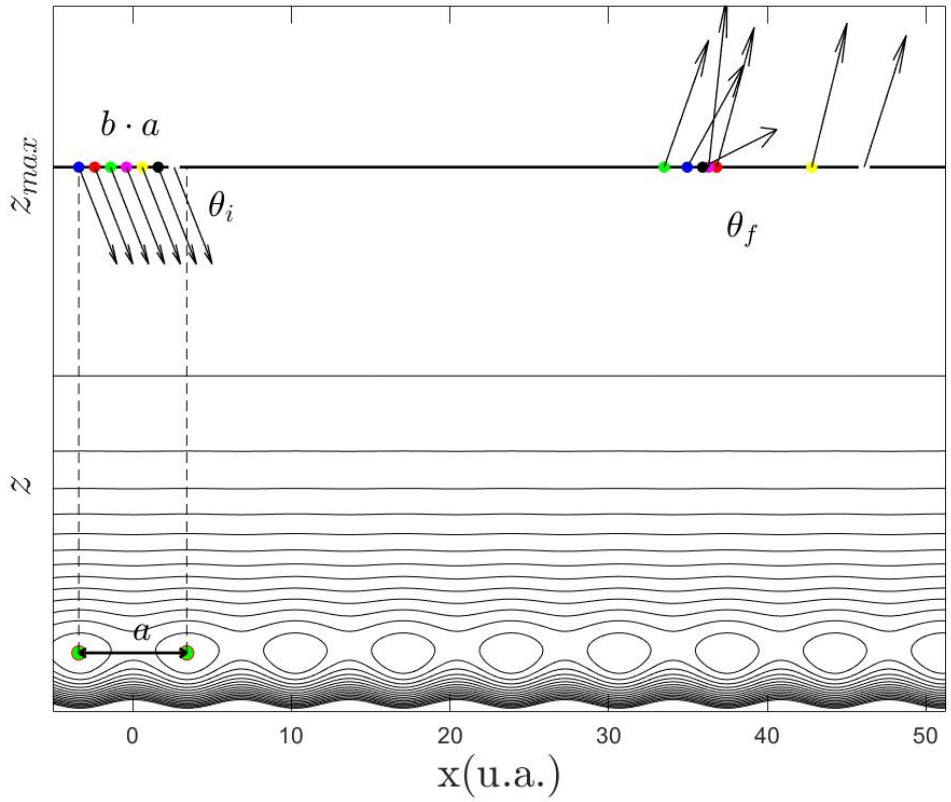


Figura 4.2: Esquema de un experimento numérico de dispersión de átomos de helio por una superficie corrugada de cobre. Los círculos de colores representan condiciones iniciales y las respectivas posiciones finales, donde el ángulo inicial es θ_i y el angulo final es θ_f, b es el parámetro de impacto que va desde 0 a 1, y a es el tamaño de una celda unidad. Las líneas negras finas son de equipotencial, y la línea negra gruesa delimita la distancia, z_{max}, donde consideramos despreciable el efecto del potencial.

asintótica de la siguiente forma

$$\theta_f = \arctan\left(\frac{p_x}{p_z}\right). \tag{4.3}$$

La función de dispersión se calcula para un conjunto de trayectorias lanzadas desde z_{max} cuando regresan otra vez a ese valor de la coordenada perpendicular. Estas, debido a la interacción con el potencial, acaban escapando del mismo, ya sea mediante dispersión directa (la componente p_z del momento del helio cambia de signo sólo 1 vez) o después de permanecer temporalmente atrapadas por la superficie efectuando

una serie de rebotes sobre la misma y donde la componente p_z del momento del helio cambia de signo repetidamente antes de escapar del potencial.

Otra posibilidad, interesante desde el punto de vista teórico, es el caso en el que el átomo de helio se lanza desde la zona de interacción con el potencial, en lugar de en la zona asintótica, y con el suficiente momento en la dirección horizontal x, de forma que esté permanentemente atrapado dentro de esta zona. Estos casos corresponden a la parte regular del espacio de fases de este sistema, como se verá más adelante.

4.1.2 Descripción de una superficie corrugada de cobre y potenciales asociados

La corrugación superficial depende de cómo se corta un cristal al formar una nueva superficie. Para el caso de la dispersión átomos de helio por superficies de cobre, existen diversos estudios experimentales de referencia de la correspondiente difracción en condiciones tanto elásticas como inelásticas realizados por Lapujoulade et al. [109,110] usando 4 tipos de superficies de cobre orientadas cristalográficamente por orden creciente de corrugación (en esta Tesis usaremos indistintamente los términos orientaciones cristalográficas y corrugación): (110), (113), (115) y (117). En estos estudios experimentales se obtuvo la función de dispersión, es decir, intensidad o número de átomos para cada ángulo final, en función de la temperatura de la superficie. A partir de ellos se consiguió extrapolar dichas intensidades de difracción a temperatura de 0 K, en los que, como hemos indicado anteriormente, la energía mecánica del átomo de helio se conserva a lo largo del proceso de colisión. En esta situación, el potencial de interacción átomo-superficie es fijo e independiente del tiempo. Por el contrario, cuando la colisión es inelástica ($T > 0$ K) sí que se intercambian fonones entre el átomo y la superficie, debido al movimiento de vibración de esta última, lo que hace que el átomo incidente pueda cambiar de energía, como estudiaremos en detalle en el capítulo 7.

El corte para conseguir la orientacion cristalografica (110) se obtiene al seccionar el cristal en un plano paralelo a $[1, 1, 0]$, y en planos que forman ángulos

$22.24°, 15.79°, 11.42°$ respecto al eje anterior para las orientaciones cristalograficas (113), (115) y (117).

Para la modelización de la interacción entre los átomos de helio y las distintas superficies de cobre, se utiliza el llamado potencial de Morse corrugado, que expande la periodicidad de la superficie en series de Fourier, de la siguiente manera

$$U(x,z) = V_0(z) + \sum_{G\neq 0} U_G(z) e^{iGx}. \tag{4.4}$$

En esta expresión, $V_0(z)$ es una función de Morse con la forma

$$V_0(z) = De^{-\chi z}(e^{-\chi z} - 2), \tag{4.5}$$

y $U_G(z)$ son los coeficientes de la expansión de Fourier. Estos últimos se determinan por ajuste a los resultados experimentales, y se expresan como

$$U_G(z) = DV_G e^{-2\chi z}, \tag{4.6}$$

donde los parámetros del Morse D y χ, que se recogen en la tabla 4.2, dan cuenta de la profundidad del pozo de potencial y de su *rigidez*. Por otro lado, los parámetros V_G, responsables de la forma y la amplitud de la corrugación, son generalmente números complejos. En la tabla 4.1 se muestran los valores de V_G para dos energías iniciales del helio; para otras energías, pueden obtenerse interpolando linealmente los resultados de esta tabla.

El término de energía potencial (4.2) que da el acoplamiento entre las dos coordenadas del movimiento, también se puede escribir como

$$V_c(x,z) = V_z(z)V_x(x), \tag{4.7}$$

con

$$V_z(z) = De^{-2\chi z}, \tag{4.8}$$

y un potencial periódico en x, dado por

$$V_x(x) = \sum_{n=1}^{4} \left[r_n \cos\left(\frac{2\pi x}{a}\right) + s_n \sin\left(\frac{2\pi x}{a}\right) \right], \tag{4.9}$$

donde r_n y s_n son la parte real e imaginaria de los coeficientes de la tabla 4.1. En la figura 4.3 se representa la forma del potencial en la zona de interacción para el Cu(110).

Tabla 4.1: Coeficientes de corrugación V_G en la ecuación (4.6) en función de la orientación cristalográfica ($nm\ell$) de la superficie de cobre y la energía de los átomos de helio.

nmℓ	V_1	V_2	V_3	V_4
		E=21meV		
110	(0.03,0)	(0.0004,0)		
113	(0.0708,0)	(0.0025,0)		
115	(0.1758,-0.0259)	(0.0052,0.0055)		
117	(0.1828,-0.0836)	(0.0593,0.0157)	(0.0116,0.0002)	(0.0017,0.001)
		E=63meV		
110	(0.0454,0)	(0.001,0)		
113	(0.0885,0)	(0.0039,0)		
115	(0.2147,-0.0252)	(0.0131,0.0044)		

Tabla 4.2: Parámetros de red y del Morse $V_0(z)$ en la ecuación (4.5) para los átomos de helio con $E = 21$ meV y diferentes orientaciones cristalográficas de la superficie de cobre.

Orientaciones cristalográficas	a(Å)	D(meV)	χ(Å^{-1})
110	3.6	6.35	1.35
113	4.227		
115	6.625		
117	9.12		

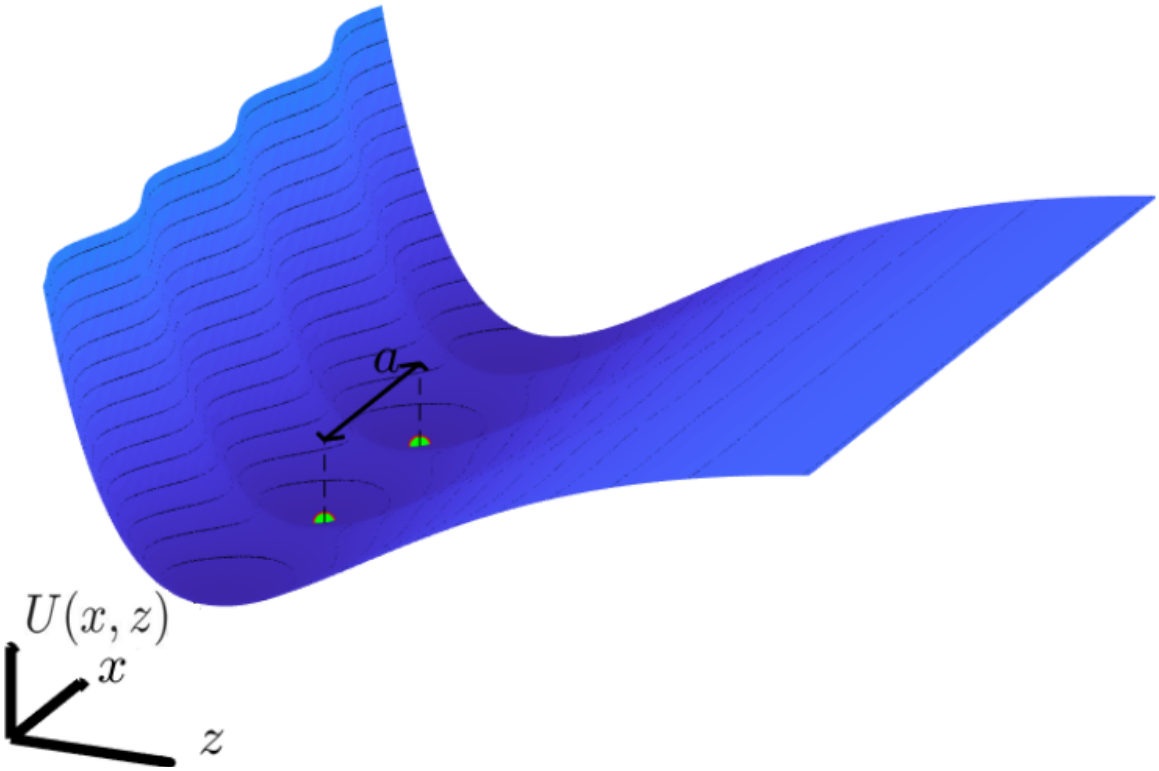


Figura 4.3: Potencial Morse corrugado (4.2) utilizado en las simulaciones de dispersión de átomos de helio por una superficie corrugada de cobre (110). Los puntos verdes indican la posición de dos de los mínimos del potencial y la flecha que los une es el tamaño de la celda unidad a, distancia en la que el potencial es periódico en x.

4.2 Análisis de la función de dispersión

En la figura 4.4 se muestra la función de dispersión calculada de forma numérica simulando un experimento de difracción de átomos de helio a 21 meV con una superficie de cobre (110), fijando para las condiciones iniciales el ángulo inicial $\theta_i = 89.999°$, de manera que la función de dispersión solo depende del parámetro de impacto, b, como se ha expuesto en la sección 4.1.1. Aunque esta elección parece ciertamente 'extraña' en principio, ya que implica lanzar los átomos de helio casi paralelos a la superficie de cobre, se justifica por su interés teórico como se verá más adelante en la siguiente sección del capítulo.

A primera vista se observa en la figura 4.4 que la función parece constar de tres partes bien diferenciadas, una primera para $b \lesssim 0.4$ en la que la función cambia de

manera continua y suave con el parámetro de impacto, una segunda parte central para $0.4 \lesssim b \lesssim 0.9$ en la que la función aparece como una nube de puntos con numerosas discontinuidades y formas tipo parábola muy picudas entremezcladas, y por fin una tercera para $b \gtrsim 0.9$ con comportamiento análogo al de la primera. En realidad, la función de dispersión sólo está compuesta de dos partes diferentes, ya que la primera y la tercera hay que suponerlas conectadas cilíndricamente debido a la periodicidad del potencial. Utilizando el indicador de caos de sensibilidad extrema a las condiciones iniciales, se puede considerar que la dinámica en la primera región es regular (*zona regular*), ya que aquí pequeñas variaciones en el parámetro de impacto inicial conducen a ligeras variaciones en el valor del ángulo final. Por el contrario, en la zona central es de esperar una dinámica caótica con tremendas variaciones, en general, en los resultados finales de trayectorias que empiezan con condiciones iniales parecidas (*zona de dispersión caótica* o de *chattering*).

Por otra parte, cuando se examinan en detalle las trayectorias utilizadas en la confección de la figura 4.4 se observa que las correspondientes a la primera región son trayectorias de dispersión directa, en la que el helio se acerca a la superficie, choca con ella y se encamina después hacia la zona asintótica, en un proceso en la que la componente z del momento cambia sólo una vez de signo. Por el contrario, las trayectorias en la zona central son mucho más complicadas, y en ellas el helio pierde demasiada energía en el modo z en el primer choque con la superficie, de forma que sufre múltiples choques con ella, hasta que por fin gana suficiente energía perpendicular para alcanzar la zona asintótica, sin retornar de nuevo a la zona de interacción. En este proceso p_z cambia múltiples veces de signo y el átomo de helio resulta temporalmente atrapado en la zona próxima a la superficie metálica. Como resultado de los diferentes rebotes, el átomo pierde memoria de las condiciones iniciales, dando este efecto origen a caos o dispersión caótica.

En la zona caótica, la dinámica aparentemente exhibe un comportamiento aleatorio e irregular, pero no es realmente así. En realidad, lo que hay es una estructura *fractal* con propiedades de autosimilaridad o simetría de escala, a la que corresponde una jerarquía dinámica de las trayectorias bien establecida. Por ejemplo, si consideramos una ampliación de la zona caótica de nuestra función de

dispersión, lo que vemos es que está compuesta de pequeñas zonas regulares (*primera generación del fractal*), con forma de 'parábolas' picudas. Además, estas primeras 'parábolas' están separadas entre sí, de nuevo, por una nube de puntos aparentemente caótica. Si ampliamos de nuevo esta zona, aparecen nuevas formas regulares con forma de 'parábola'. Estas segundas constituyen lo que podemos considerar la *segunda generación del fractal*, como continuación de la primera generación que corresponde a la estructura caótica antes de ampliar en la figura 4.4. A estas estructuras regulares se les denomina en la bibliografía *iciclos* [111].

Prosiguiendo nuestro análisis, se observa que las trayectorias que pertenecen a

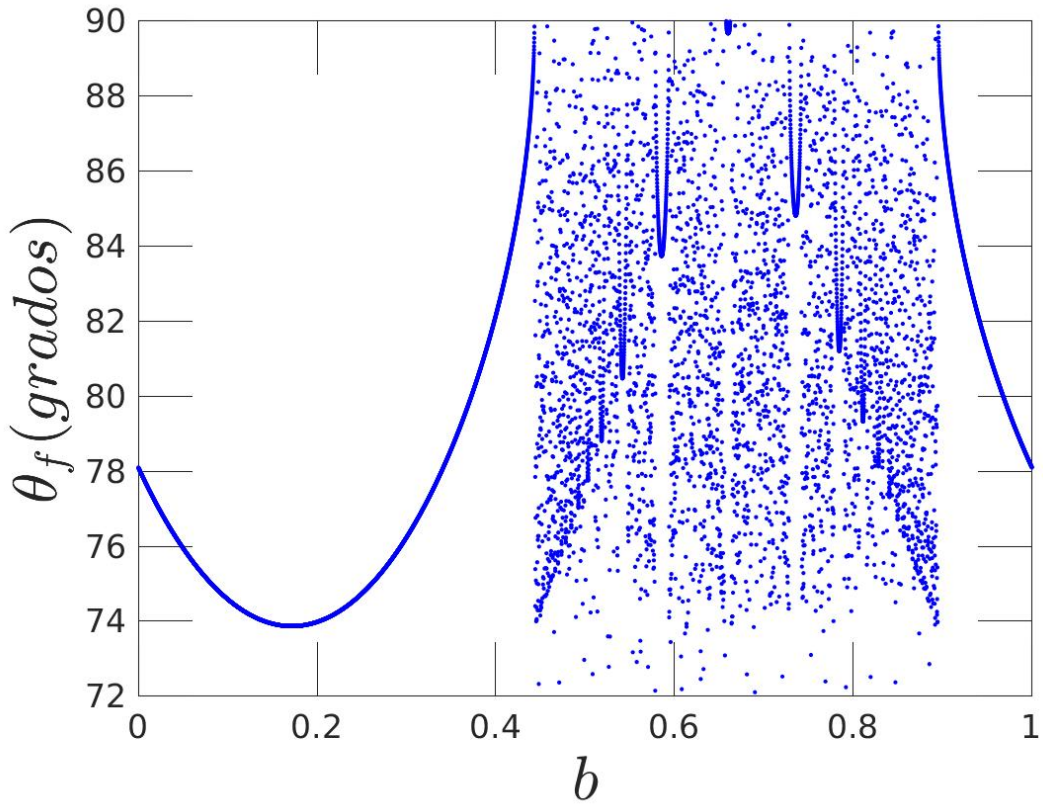


Figura 4.4: Función de dispersión, representada como ángulo final frente al parámetro de impacto inicial, para la dispersión de átomos de helio con una energía de $E = 21$ meV y un ángulo inicial de $\theta_i = 89.999°$ colisionando con una superficie de cobre con orientación cristalográfica (110).

iciclos de una misma generación del fractal tienen la misma estructura, dada por el número de puntos de retorno, es decir, rebotan contra la superficie el mismo número de veces. Por otra parte se diferencian en el número de celdillas unidad que saltan entre cada dos rebotes consecutivos. En el caso de los iciclos de primera generación del fractal, las trayectorias tienen dos puntos de retorno, efectuando un salto o vuelo sobre la superficie metálica entre ellos. La diferencia entre cada uno de los iciclos es el número de celdas unidad que atraviesa el átomo de helio entre los puntos de retorno, es decir, entre los choques con la superficie. Así, etiquetaremos cada iciclo de primera generación con un símbolo $[n]$ donde n son las celdas unidad que atraviesa entre rebotes, debido a que la distancia entre los puntos de retorno no suele ser un número entero de veces la celda unidad, vamos a considerar que el número de celdas atravesadas es una más de las que cruza, así, cuando el helio atraviese 7 celdas y un poco de la octava, consideramos que atravesó 8. En las figuras 4.5(a) y (b) hemos representado en color azul, rojo, verde, magenta y amarillo los iciclos correspondientes a $[8]-[12]$, respectivamente. En la figura 4.5 (c) se ha representado una trayectoria que pertenece al iciclo [8], y en la figura 4.5 (d) otra perteneciente al iciclo [9] en unidades atómicas (u.a.). En ellas se observa que la trayectoria en el segundo caso atraviesa una celda unidad más que en el anterior, y, al pertenecer las dos trayectorias a iciclos de la misma generación tienen en común el mismo número de puntos de retorno.

Consideremos a continuación trayectorias en iciclos de las siguientes generaciones. Por ejemplo, en la segunda generación las trayectorias chocan 3 veces con la superficie, y por tanto se podrán etiquetar con 2 números enteros $[n, m]$ donde n es el número de cruces de celdillas entre los dos primeros rebotes, y m es número de cruces acumulado entre el primero y el tercero. Esta notación se puede generalizar para cualquier número de rebotes/generación en el fractal , de forma que $[r, l, ..., j]$ representa un iciclo que corresponde a trayectorias con tantos rebotes como números contiene, y que han recorrido r, l y j celdas unidad entre el primer y los sucesivos rebotes, respectivamente. En la figura 4.6(a) se presentan los iciclos de segunda generación en azul, que se sitúan entre los iciclos [8] y [9] de la generación anterior. Entre los iciclos [8] y [9], se sitúan los iciclos [9,m] donde $m = 9 + 1, 9 + 2, ..., \infty$. Podemos generalizar lo anterior diciendo que entre los iciclos $[n]$ y $[r]$, encontraremos los iciclos

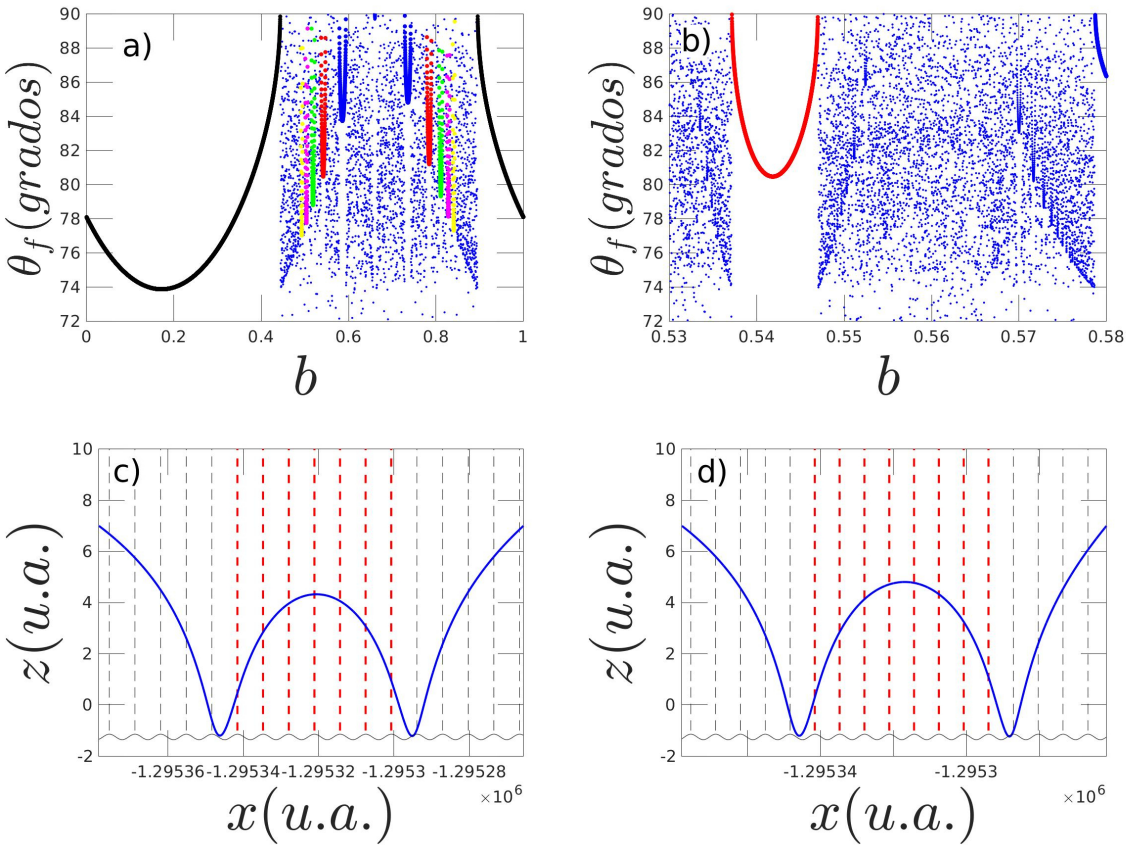


Figura 4.5: Función de dispersión del sistema, ampliación de la zona caótica y dos trayectorias representativas: (a) Ángulo final de dispersión frente al parámetro de impacto inicial. En colores azul, rojo, verde, magenta y amarillo se representan los iciclos de la primera generación [8], [9], [10], [11] y [12], respectivamente; (b) Ampliación de la curva en (a) entre los iciclos [8] y [9]; (c) y (d) Trayectorias representativas de primera generación en estos iciclos, una posición de referencia en las celdillas unidad se indica en línea vertical discontinua, y en línea vertical, discontinua y roja, las celdillas unidad que son cruzadas por la partícula entre rebotes sobre la superficie.

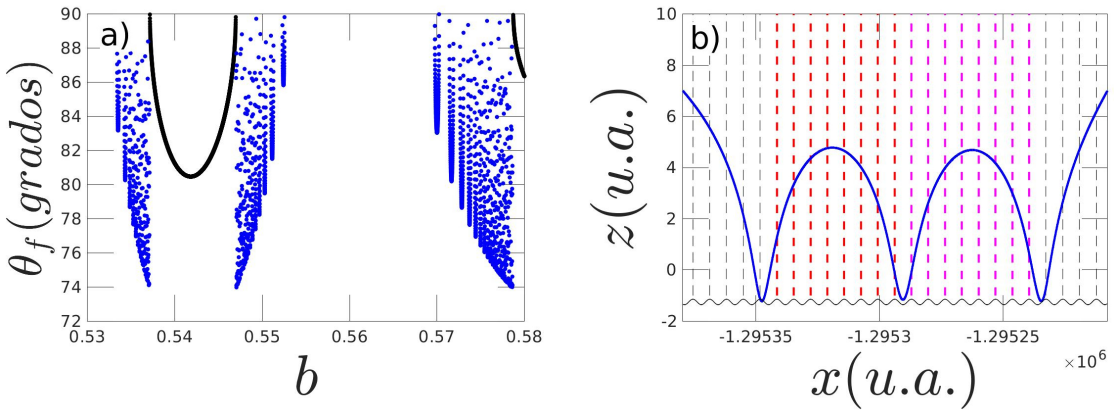


Figura 4.6: (a) Ampliación de la función de dispersión de la figura 4.5 en la región correspondiente a la segunda generación del fractal entre los iciclos [8] y [9] y (b) trayectoria representativa $[9, 17]$. Las líneas verticales discontinuas tienen el mismo significado que en la figura 4.5.

$[r, l]$, siendo esta vez $l = r + 1, ..., \infty$. En la figura 4.6(b) se representa una trayectoria que pertenece al iciclo $[9, 17]$, donde vemos que efectivamente tiene tres puntos de retorno, siendo representativa de todas las trayectorias de segunda generación.

Por último, ampliando de nuevo las regiones entre dos de los iciclos de segunda generación, lo que se muestra en la figura 4.7, obtenemos una estructura similar a las anteriores para la tercera y sucesivas generaciones de iciclos (puntos en verde para la tercera, y azul para el resto en la figura 4.7) lo que pone de manifiesto la estructura fractal de la función de dispersión del sistema [111]. Una trayectoria representativa de la tercera generación correspondiente al iciclo $[8, 16, 26]$ se muestra en el panel (b) de la figura.

Basándonos en la notación que hemos definido para etiquetar cada iciclo, se puede generar un árbol simbólico que relacione jerárquicamente todas las posibles trayectorias que aparecen en la zona caótica de la función de dispersión de nuestro caso en estudio. Éste está representado en la figura 4.8. En esta representación, cada estrato del árbol corresponde a una generación en el fractal de la función de dispersión. La construcción de este árbol comienza por la primera generación, que es el estrato de la parte superior del árbol, donde se han colocado las etiquetas de cada uno de sus iciclos, en los huecos entre los iciclos de primera generación se encuentra

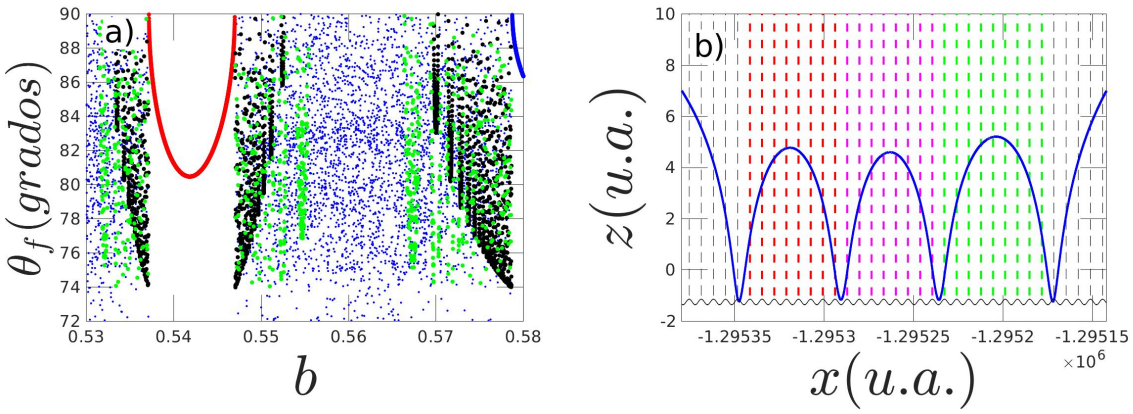


Figura 4.7: (a) Representación de la función de dispersión en la región de la figura 4.6 donde se han representado en verde los iciclos correspondientes a la tercera generación y (b) trayectoria representativa $[8, 16, 26]$. Las líneas discontinuas tienen el mismo significado que en la figura 4.6.

los de segunda, éstos se representan en el segundo estrato del árbol, y cada elemento corresponde a un grupo de iciclos, las líneas hacen referencia a los de la generación anterior entre los que se sitúan este grupo, lo mismo ocurre con los grupos de iciclos de las generaciones siguientes. Así, por ejemplo, el grupo de iciclos $[2, m+1]$ (es un grupo ya que $m = 2, ..., \infty$) se sitúa en el hueco entre los iciclos [1] y [2].

Por último, es importante mencionar que nuestro árbol simbólico en ocasiones se encuentra truncado en la parte izquierda. En el caso que se analiza en esta Tesis, centrada fundamentelmente en el caso de dispersión para 21 meV y la orientación

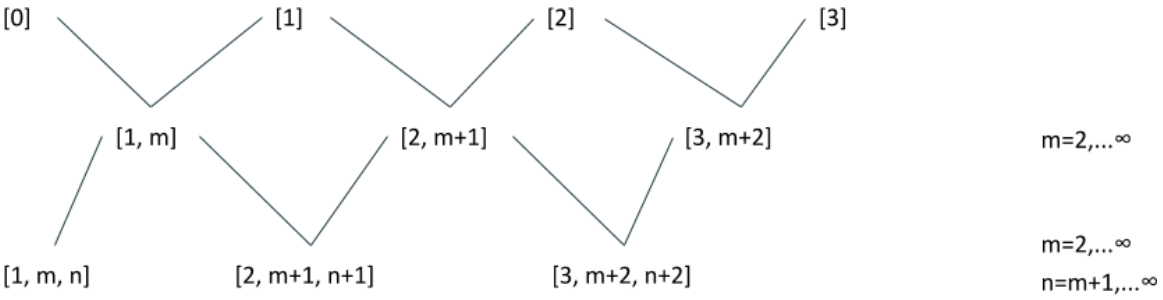


Figura 4.8: Árbol simbólico que genera todas las posibles secuencias de trayectorias en el régimen hiperbólico, usando la notación de iciclos explicada en el texto. Tomado de la referencia [111].

cristalográfica (110), los primeros iciclos que encontramos son [8] y [9], siendo sus primeros intermedios $[9, 17], [9, 18], ...,$ etc. A pesar de este truncamiento en los primeros valores, todas las propiedades anteriores se cumplen completamente.

4.3 Dispersión caótica y la estructura del espacio de fases

Como vimos en el capítulo 2, la SSP permite caraterizar fácilmente la dinámica de sistemas de dos grados de libertad. Si embargo, una SSP convencional no es suficiente para estudiar un sistema no ligado como el que nos ocupa, dado que, como se puede ver en la figura 4.5, podemos concluir que cualquier trayectoria corta solo una vez una superficie de sección típica, por ejemplo $x = \text{cte}, p_x > 0$. Por ello, en este trabajo definimos en su lugar la SSP representando el valor de z y p_z cada vez que $x = x_0 + na$. Es decir, en nuestro caso situaremos infinitas superficies de sección de acuerdo a la simetría translacional de nuestro sistema, una cada vez que $x = x_0 + na$, donde na es un número entero de veces una celda unidad de nuestra superficie metálica. Teniendo en cuenta la periodicidad de nuestro potencial, hacer esto es como reinyectar por la izquierda la partícula en el dominio fundamental cada vez que se escapa por la derecha. Con este método se podrá caracterizar el espacio de fases del sistema de la forma habitual, examinando la SSP correspondiente a varias trayectorias calculadas todas con los mismos valores de E, θ_i y orientación cristalográfica $(11l)$ de la superficie de cobre.

En los casos ligados y conservativos, la energía es una constante del movimiento y el volumen del espacio de fases disponible es finito. Sin embargo, nuestro sistema a pesar de ser conservativo, al no ser ligado, tiene un espacio de fases infinito, dado que fuera de la región de interacción la partícula se mantiene siempre con momento constante en un movimiento rectilíneo, de manera que x y z crecerán indefinidamente.

Como consecuencia de la discusión anterior podremos caracterizar la dinámica de nuestro sistema de dispersión tomando condiciones iniciales cercanas a la órbita periódica inestable fundamental de forma que propaguemos sus variedades estable e

inestable, que se cruzarán en infinitos puntos homoclínicos originando un entramado que caracteriza totalmente el caos en el sistema. Es nuestro caso esta órbita periódica inestable corresponde a las condiciones iniciales $\theta_i = 90°$ y $z \to \infty$. De la manera en la que hemos definido la SSP, esta órbita periódica inestable sería un punto fijo que se encuentra en la cola del potencial de Morse que, de acuerdo con nuestra notación, tiene periodo 1. Es interesante mencionar que este tipo de órbita periódica inestable situada en ∞ es característica de sistemas de dispersión realistas, donde se usan potenciales blandos (atractivos a distancias largas y repulsivos a cortas).

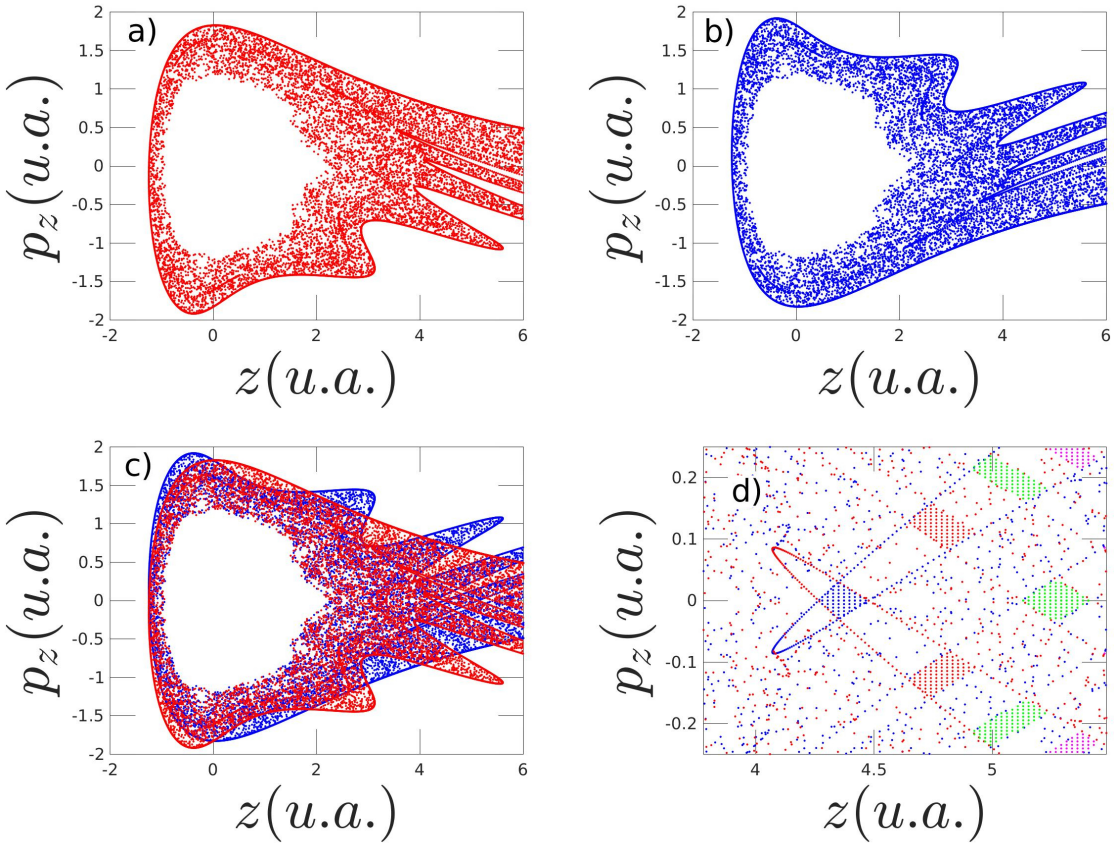


Figura 4.9: Variedades estable e inestable de la órbita periódica principal para la dispersión de átomos de helio por una superficie de cobre (110) para una energía de colisión de $E = 21$ meV. a) Variedad estable. b) Variedad inestable. c) Variedades superpuestas. d) Primeros cruces homoclínicos entre las variedades estable e inestable y que corresponden a los iciclos [8] (azul), [9] rojo y [10] (verde) de la primera generación.

La forma usual de calcular las variedades de una órbita periódica inestable es linealizando la dinámica cerca de ella, y propagando un elevado número de trayectorias, con unas condiciones iniciales que estén sobre los autovectores de la correspondiente matriz de monodromía de la órbita (ver capítulo 2). En nuestro caso, este trabajo se puede llevar a cabo de una manera muy sencilla, ya que la diámica asociada es trivial al estar en la zona asintótica del potencial. En este caso los autovectores están degenerados, y la forma más simple de aproximarnos a las variedades, calculadas de forma numérica, es propagando un gran número de condiciones iniciales, 1000 en nuestro caso, inicialmente en $z = z_{max}$ y $\theta_i = 89.999°$ y representar (z, p_z) en los cruces con la superficie de sección $x = x_0 + na$. Esto nos dará la variedad inestable. Debido a la simetría de nuestro sistema, la correspondiente variedad estable se obtiene simplemente cambiando el signo del momento $p_z \to -p_z$ a los puntos obtenidos anteriormente.

Los resultados para una energía de colisión $E = 21$ meV y la orientación cristalográfica (110) se muestra en los paneles a) y b) de la figura 4.9. En el panel c) se muestran ambas variedades superpuestas, de forma que puedan observarse los sucesivos cruces homoclínicos, y el desarrollo del correspondiente entramado homoclínico que organiza el caos de nuestro sistema. En el panel d) se muestra un ampliación del mismo en la zona correspondiente a los primeros cruces, marcados en azul, rojo y verde, respectivamente. Un examen cuidadoso del carácter de la trayectorias contenidas en los respectivos romboides muestra que estas corresponden a los iciclos [8], [9] y [10] de la primera generación de la zona caótica de la correspondiente función de dispersión.

De hecho, la estructura de la parte caótica de esta función se puede entender completamente en función de la estructura de cruces de la red homoclínica de la figura 4.9. Este resultado se ilustra de manera más completa en la figura 4.10, donde se muestra la función de dispersión y los cinco primeros iciclos de la primera generación [panel a)], junto con los cruces correspondientes en la red homoclínica asociada [panel b)], utilizando en ambos casos los mismos colores para facilitar la comparación. Podemos ver cómo cada uno de los iciclos de la función de dispersión tiene su correspondencia en la SSP y como hemos visto al describir la figura 4.9(d),

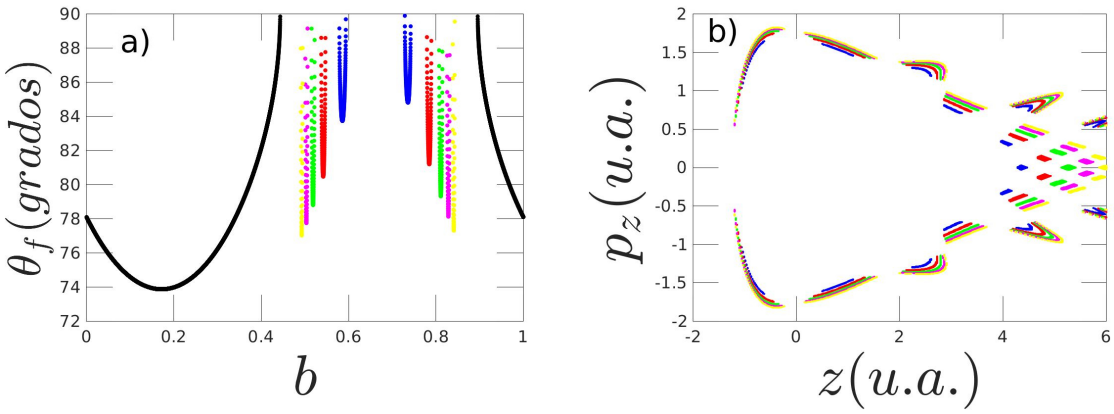


Figura 4.10: Iciclos de primera generación y la representación de los mismos en la superficie de sección de Poincaré (a) Iciclos [8], [9], [10], [11] y [12] con códigos de color azul, rojo, verde, magenta y amarillo, respectivamente. (b) Áreas encerradas por los cruces de las variedades, estable e inestable, etiquetadas con los mismos códigos de color que en el panel a).

corresponden al área encerrado entre los cruces de las variedades estable e inestable.

Además de existir una correspondencia entre los iciclos de la primera generación y los cruces de las variedades, existe también una relación entre los iciclos de las generaciones posteriores y los cruces subsiguientes intermedios que se sitúan entre los correpondientes a la primera generación. Existe, por tanto, una correspondencia total entre cada iciclo de la función de dispersión y cada cruce en la superficie de sección. Como consecuencia de esta correspondencia, el esquema de árbol definido en la sección anterior está completamente representado en el espacio de fases, por lo que es una excelente herramienta para la esquematización del mismo, teniendo por cada etiqueta de nuestro árbol simbólico una región que corresponde al cruce de variedades.

Por último vamos a ver cómo es el órden de iteración en que aparece una trayectoria en la superficie de sección y cómo se relaciona con su posición en las diferentes generaciones de la región fractal de la función de dispersión. Para ello vamos a representar en negro la proyección de una trayectoria representativa en el espacio de fases total sobre la superficie de sección que utilizamos para la construcción de las SSP, y se representan con diferentes símbolos los cruces con la misma.

En la figura 4.12 mostramos un ejemplo de una trayectoria de primera generación

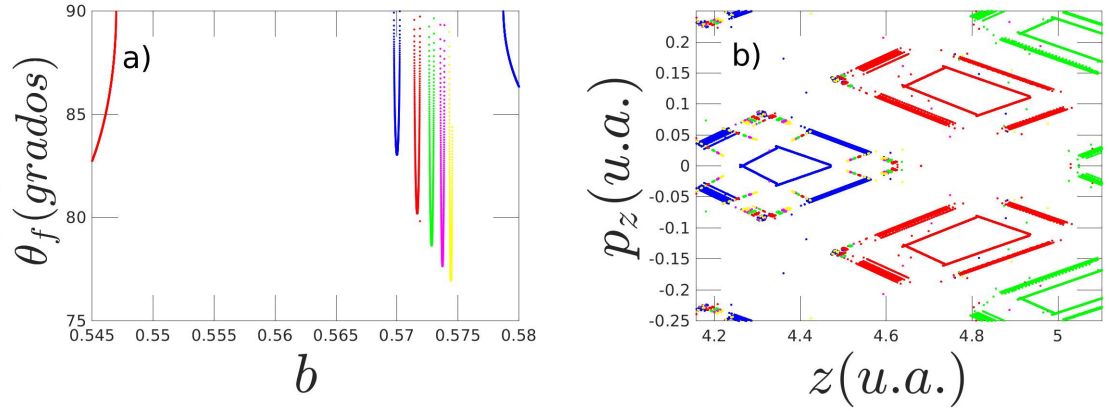


Figura 4.11: Iciclos de segunda generación, y cruces de las variedades invariantes. (a) Iciclos $[8,16],[8,17],[8,18]$, $[8,19]$ y $[8,20]$ con código de color azul, rojo, verde, magenta y amarillo, respectivamente. (b) Líneas que delimitan los cruces de las variedades invariantes estable e inestable, etiquetadas con el mismo código de color.

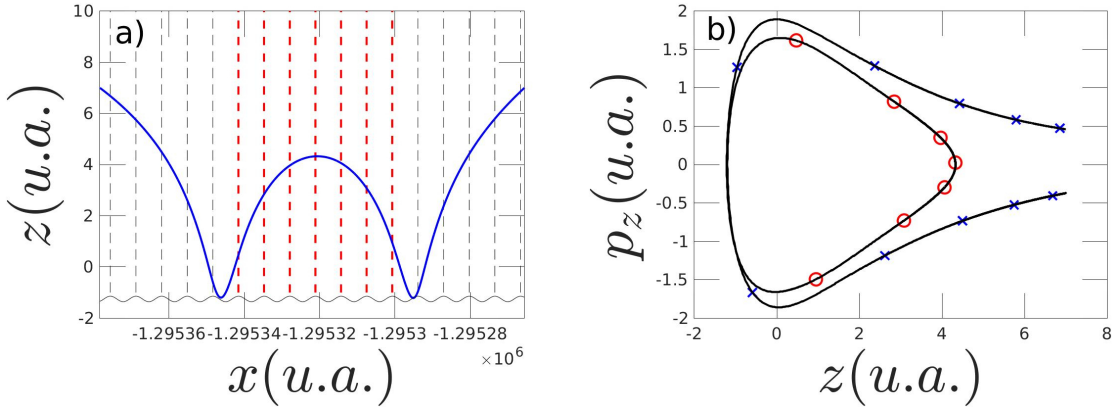


Figura 4.12: a) Trayectoria representativa de la primera generación dentro del iciclo [8] en la zona caótica de la función de dispersión de la figura 4.4, y b) su proyección en la superficie de sección utilizada en la construcción del mapa de Poincaré (SSP), junto con los puntos de corte con la misma. En azul se representa la trayectoria en el espacio de configuraciones, en línea discontinua las superficies de sección, siendo las rojas las que se cruzan entre choques con la superficie metálica, en negro se representa la proyección de la trayectoria sobre la superficie de sección. Los círculos rojos indican los cortes durante el período entre rebotes, y las cruces azules el resto de cortes con la superficie de sección

.

en el iciclo [8] en la zona caótica de la función de dispersión de la figura 4.4, proyectada tanto en el plano de configuraciones (x, z) como en el (z, p_z). Se observa en los dos paneles cómo la partícula viene desde z_{max} con $p_z < 0$. En este intervalo los cruces azules en el panel b) indican los puntos en que la trayectoria cruza la superficie de sección. Al rebotar contra la superficie metálica la componente z del momento cambia de signo, el valor de z pasa de disminuir a aumentar y la trayectoria en b) pasa al semiplano superior. A partir de este momento la trayectoria está atrapada por el potencial, y marcamos los cruces con la superficie de sección con círculos rojos. La trayectoria sigue su curso hasta que ocurre un nuevo rebote contra el metal, donde p_z vuelve a cambiar de signo y el átomo de helio prosigue su curso hasta la zona asintótica; ahora marcamos de nuevo los cruces con la superficie de sección con cruces azules. Lo interesante es observar que durante el 'vuelo' de la partícula sobre el metal la trayectoria ha realizado un ciclo cerrado completo en el plano (z, p_z), y si contamos el número de cruces con la superficie de sección dentro de él (número de círculos rojos) y le sumamos 1 (al no recorrer un número entero de celdas unidad) coincide con la etiqueta asociada al correspondiente iciclo.

Lo mismo ocurre con las trayectorias de las sucesivas generaciones en el fractal de la figura 4.4. Así en las figuras 4.13 y 4.14 se muestran ejemplos representativos

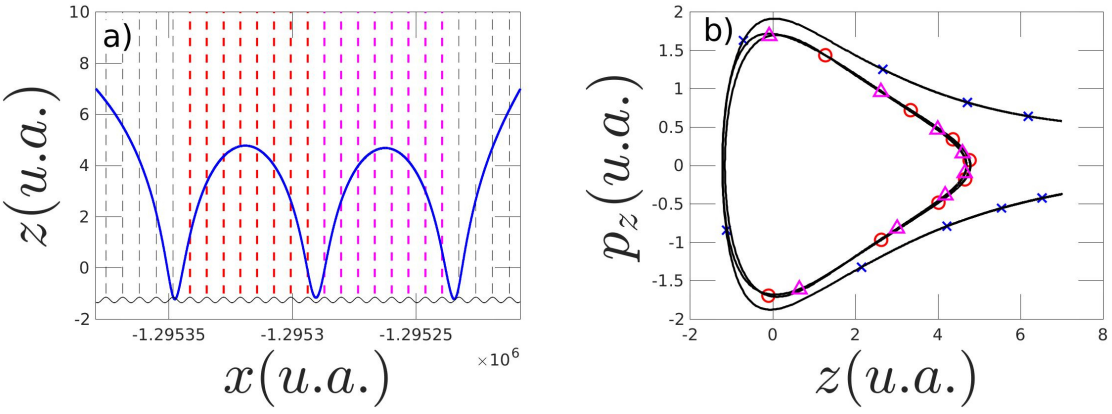


Figura 4.13: Lo mismo que la figura 4.12 para una trayectoria en la segunda generación de iciclos en la zona caótica de la función de dispersión de la figura 4.4

.

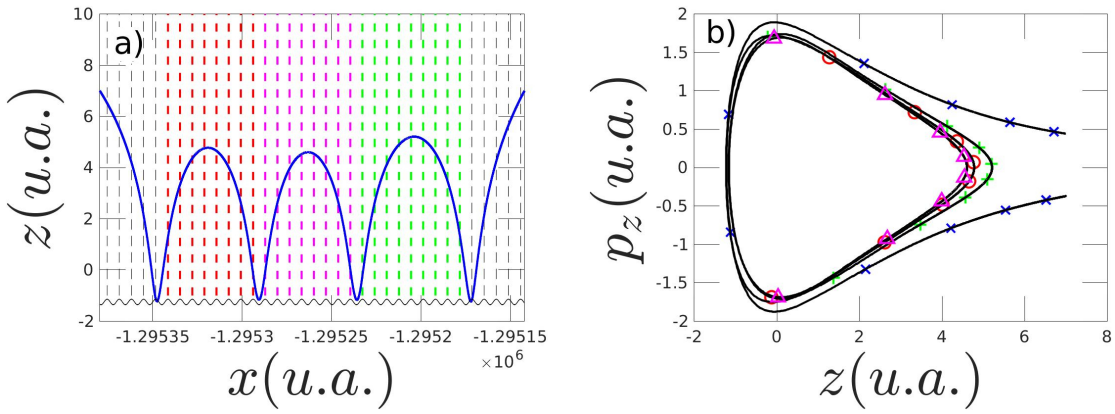


Figura 4.14: Lo mismo que la figura 4.12 para una trayectoria en la tercera generación de iciclos en la zona caótica de la función de dispersión de la figura 4.4

.

de la segunda y tercera generaciones. La única diferencia con el caso anterior es que ahora estas trayectorias ejecutan dos y tres ciclos cerrados en el plano (z, p_z) antes de escapar a la zona asintótica.

Concluimos, por tanto, el capítulo habiendo descrito tres formas diferentes de visualizar o representar la dinámica del sistema He-Cu(110). En primer lugar, hemos asociado los iciclos que aparacen en la región caótica de la función de dispersión *versus* el parámetro de impacto b con trayectorias atrapadas con diferentes características en función de la generación en que se hallan. En segundo lugar, hemos relacionado estos iciclos con las distintas zonas del espacio de fases definidas por los cruces de la red homoclínica generada por las variedades de la órbita inestable que circula paralela a la superficie del metal. Por úlimo, todo esto se ha esquematizado en un árbol simbólico que etiqueta todo el espacio de fases y la función de dispersión.

Parte II

Resultados

Capítulo 5

Localización dinámica y cuantización en gotas caminantes

Muchas han sido las analogías que se han encontrado entre el sistema GCs y la mecánica cuántica. En este capítulo vamos a analizar algunas analogías que todavía no se han explorado, como son la condición de cuantización del sistema y la localización dinámica de las trayectorias alrededor de órbitas periódicas inestables.

La estructura del capítulo es la siguiente. En primer lugar, en la sección 5.1, se presentará el potencial externo utilizado. A continuación, en la sección 5.2, describimos la localización dinámica de las trayectorias del sistema en el régimen de *baja memoria*. Por último, en las secciones 5.3 y 5.4, se explora el mecanismo de cuantización del sistema junto con su constante de cuantización de forma análoga a lo que ocurre en la mecánica cuántica.

5.1 Potencial externo

En este trabajo hemos elegido utilizar un potencial externo que garantice que, en ausencia de los efectos debidos a la superficie de ondas, las trayectorias de las partículas sean muy caóticas. Esta función potencial debe incluirse en ecuación (3.30).

Una opción muy popular para este tipo de potenciales son los billares caóticos, como el estadio Bunimovitch, que se ha utilizado con frecuencia tanto en estudios

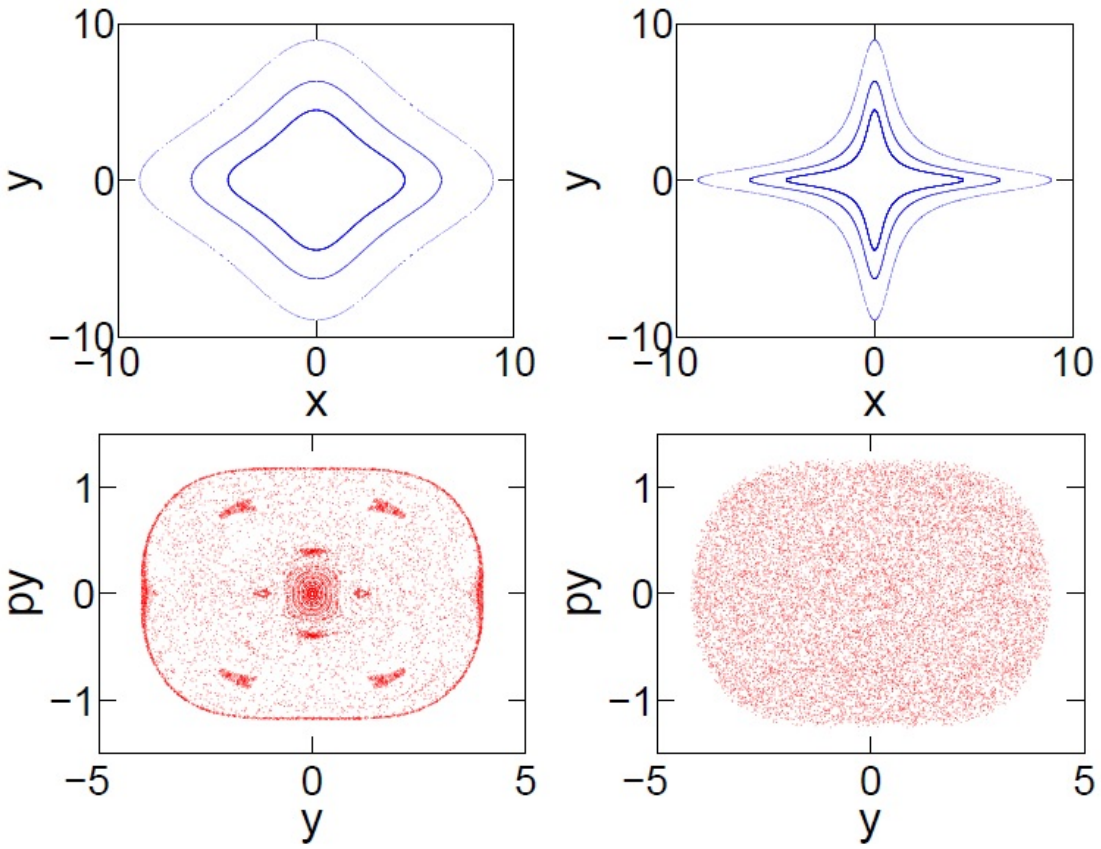


Figura 5.1: Oscilador cuártico bidimensional acoplado dado por la expresión (5.1). (Arriba) Curvas de equipotencial con $V = 1, 4$ y 16 para dos conjuntos de parámetros $\alpha_2 = 1/100$, y $\alpha_1 = 1/20$ (izda) y $\alpha_1 = 1$ (dcha). (Abajo) Superficie de sección Poincaré compuesta para $E = 1$ y masa $m = 1$ (ver el texto para más detalles).

teóricos como experimentales [16,112]. Sin embargo, en nuestro caso, preferimos usar una función suave y en particular el oscilador cuártico bidimensional acoplado dado por

$$V(x, y) = \frac{\alpha_1}{2} x^2 y^2 + \frac{\alpha_2}{4}(x^4 + y^4). \tag{5.1}$$

En la parte superior de la figura 5.1 presentamos las líneas de equipotencial del potencial cuártico (5.1) para dos conjuntos de valores de los parámetros, α_1 y α_2.

El potencial (5.1) se ha elegido por por varias razones. En primer lugar, es un potencial continuo y suave, lo que lo hace más adecuado para estudios numéricos que los billares, que son discontinuos en la frontera. En segundo lugar, este potencial

es homogéneo por lo que las trayectorias exhiben similitud mecánica. Es decir, el movimiento clásico a cualquier valor de la energía puede obtenerse escalando los resultados obtenidos a una energía de referencia. Esto implica que la estructura del espacio de fases se conserva con la energía (no hay bifurcaciones), lo que simplifica considerablemente su estudio. En tercer lugar, al usar este potencial se evitan las complicaciones (discontinuidades) que aparecen en los billares debidas a los rebotes contra paredes duras (aunque para en el caso de las trayectorias de las GCs esto se hace considerando que la onda también rebota en las paredes), es decir, que este potencial hace más sencillas las condiciones de contorno. En cuarto lugar, el comportamiento dinámico de este sistema es extremadamente caótico, y libre de los movimientos marginalmente estables que presentan otros sistemas similares como el estadio de Bunimovich [16]. Por último, el potencial (5.1) se ha utilizado ampliamente en multitud de estudios de caos clásicos y cuánticos [113].

En este punto, debe observarse que aunque crear tal potencial en una configuración experimental no es una tarea fácil, tampoco es imposible en principio, dado que se puede obtener, al menos en cierta medida, configurando adecuadamente la parte inferior del recipiente del fluido, y/o usando de forma adecuada campos magnéticos y un fluido ferromagnético.

El potencial cuártico (5.1) incluye dos parámetros α_1 y α_2 cuyos valores determinan el grado de caoticidad del mismo. Por ejemplo, para $\alpha_1 = 1$ y $\alpha_2 = 1/100$ las trayectorias correspondientes presentan un alto grado de caoticidad, como se observa en el panel inferior derecho de la figura 5.1, donde se presentan las correspondientes surperficies de sección de Poincaré compuestas definidas por $x = 0$ y $p_x > 0$. En realidad, durante mucho tiempo se pensó que en el límite $\alpha_2 \to 0$ la dinámica de este sistema era totalmente ergódica, hasta que Dahlquist y Russberg encontraron una familia de pequeñas islas de regularidad [114]. A medida que disminuye el valor de α_1, el potencial da lugar progresivamente a una dinámica más regular. Como se puede ver en la figura 5.1, para el valor más bajo de α_1 considerado (panel inferior izquierdo), la dinámica es más regular, y se pueden ver pequeñas islas de regularidad inmersas en un mar de caos generalizado. Por el contrario, para $\alpha_1 = 1$ (panel inferior derecho) todo el espacio de fases disponible

tiene un carácter altamente caótico (véase la referencia [114]). Por otra parte, para casos especiales, como $\alpha_1 = 0$ ó $\alpha_1 = \alpha_2 = 1$, el comportamiento es completamente regular. Por el contrario, cuando $\alpha_1 \neq 0$ entonces existe acoplamiento entre las coordenadas, lo que abre una puerta a la existencia de caos.

5.2 Localización dinámica

En esta sección, usamos el primer conjunto de parámetros del potencial mostrado en la figura 5.1, es decir, $\alpha_2 = 1/100$ y $\alpha_1 = 1/20$, correspondientes a la dinámica más regular, ya que aquí el análisis del efecto de la onda piloto en las trayectorias es más sencillo.

5.2.1 Trayectorias

A continuación presentamos varias trayectorias para el sistema GCs calculadas al integrar numéricamente la ecuación (3.30) usando la función potencial (5.1), para diferentes valores del tiempo característico, T_v.

En primer lugar, mostramos en la figura 5.2(a) una trayectoria típica para el oscilador cuártico en el caso sin fricción, es decir, para $T_v \to \infty$, y en la figura 5.2(b) una trayectoria para una frición muy pequeña, $T_v = 0.9$, ambas calculadas para las mismas condiciones iniciales y un valor de la velocidad media de $v_0 = 1$. En el caso sin fricción, que está representado en las figuras 5.2 (a) y (c), la órbita es totalmente caótica. Este resultado es congruente con el que cabría esperar al observar la SSP sin memoria mostrada en los paneles superiores de la figura 5.1 (a), en los que se observa la dinámica caótica en la mayor parte del espacio de fases. Sin embargo, cuando se introduce algo de memoria fijando $T_v = 0.9$, valor que puede considerarse dentro del límite de baja memoria, la trayectoria (después de un breve periodo transitorio que no se muestra en la figura) se estabiliza en un movimiento periódico, a pesar de que esa región la dinámica clásica hamiltoniana correspondiente, es decir, sin tener en cuenta las contribuciones de las GCs, es totalmente irregular, como se aprecia en la SSP de la figura 5.1 panel inferior izquierdo. En realidad, aquí (baja memoria) es el efecto de

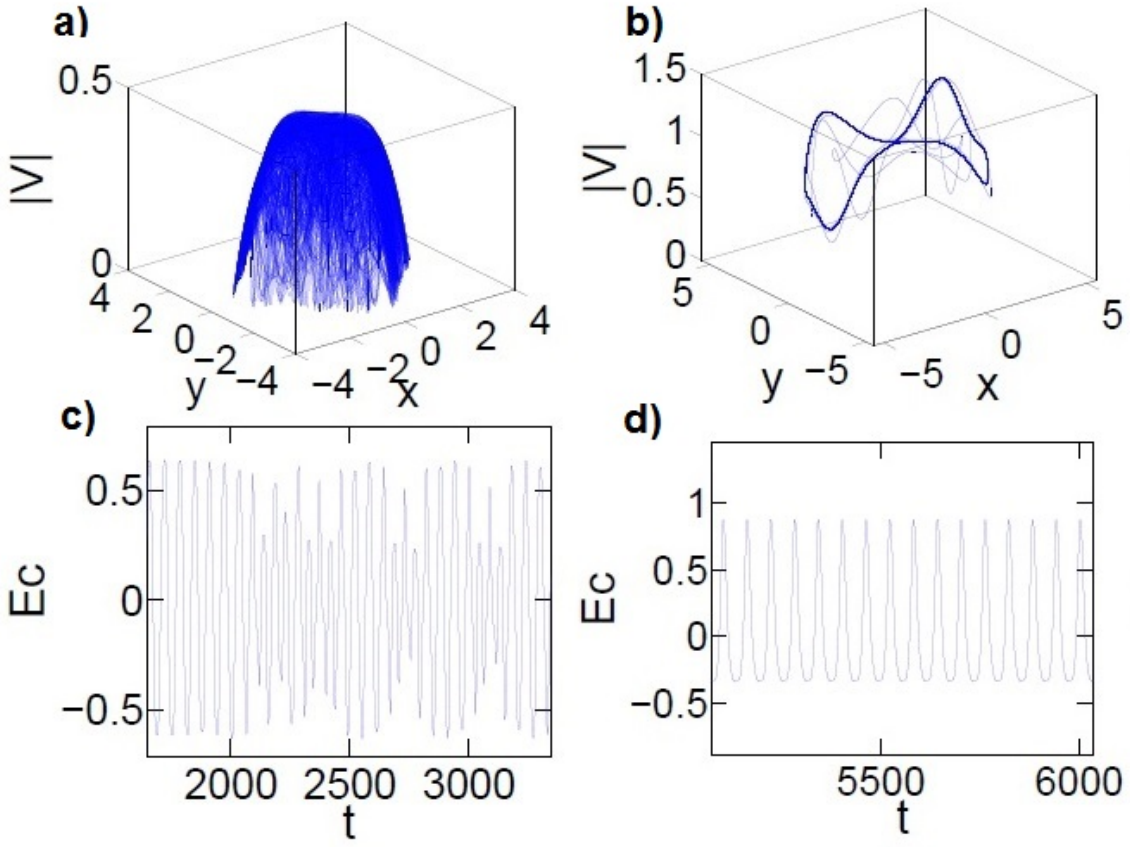


Figura 5.2: Dos trayectorias representativas del sistema GCs sometidas a una potencial cuártico con $\alpha_2 = 1/100$, $\alpha_1 = 1/20$ y $v_0 = 1$ y su energía potencial para: (a) caso sin fricción, $T_v \to \infty$, y (b) límite para baja fricción para $T_v = 0.9$. (c-d) Evolución temporal de la correspondiente energía cinética.

la onda piloto el que causa tal estabilización. La conclusión de los resultados en esta figura es muy clara: el parámetro T_v es muy relevante en nuestro estudio, y por tanto debemos explorar como varía el comportamiento dinámico que presentan las GCs en función del mismo.

En la figura 5.3 mostramos los resultados de dicha exploración. En ella, hemos dibujado algunas trayectorias de GCs representativas con un potencial cuártico para distintos valores del tiempo característico, T_v, cuyo inverso controla el término de fricción de Rayleigh y es proporcional a la memoria. Cada fila horizontal consta de dos ejemplos calculados con el mismo valor de T_v pero con diferentes condiciones iniciales. Como se puede ver, la dinámica de las trayectorias es muy sensible al valor de T_v, siendo más caótica para los valores más pequeños del parámetro y más regular para los valores más grandes, como cabría esperar *a priori*. ya que el término de Rayleigh tiende a estabilizar la velocidad de la GC a la velocidad media v_0, siendo la fricción positiva o negativa dependiendo de si la velocidad de la GC es mayor o menor en relación a v_0. Además, para los mismos valores de T_v, las trayectorias que se obtienen a tiempos lo suficientemente largos son muy similares, incluso estabilizándose en movimientos periódicos que son equivalentes por simetría.

Para investigar más a fondo la sensibilidad de las trayectorias al valor de T_v, presentamos algunos ejemplos más en la figura 5.4. En ella, representamos algunas trayectorias para valores más altos de T_v, marcando por separado, en azul y en verde, respectivamente, las partes transitorias y las estacionarias del movimiento. La existencia de estos dos regímenes diferenciados nos indica que existe un régimen transitorio después del cual se alcanza un movimiento estacionario debido a la existencia de un atractor en la dinámica del sistema. Como se puede ver, el atractor presenta una forma similar a una pajarita redondeada o figura de ocho. Además en los primeros tres casos el atractor final es esencialmente el mismo (dejando de lado las pequeñas diferencias debidas al valor concreto de T_v) o equivalente por simetría. Sin embargo, cuando el valor de T_v aumenta aún más (disminuyendo, por tanto, el efecto del término de fricción), por encima de $T_v = 1.0$ todas las trayectorias se vuelven caóticas, sin estabilizarse en ningún régimen estacionario reconocible. Estos resultados confirman nuevamente la sensibilidad de la dinámica de las trayectorias

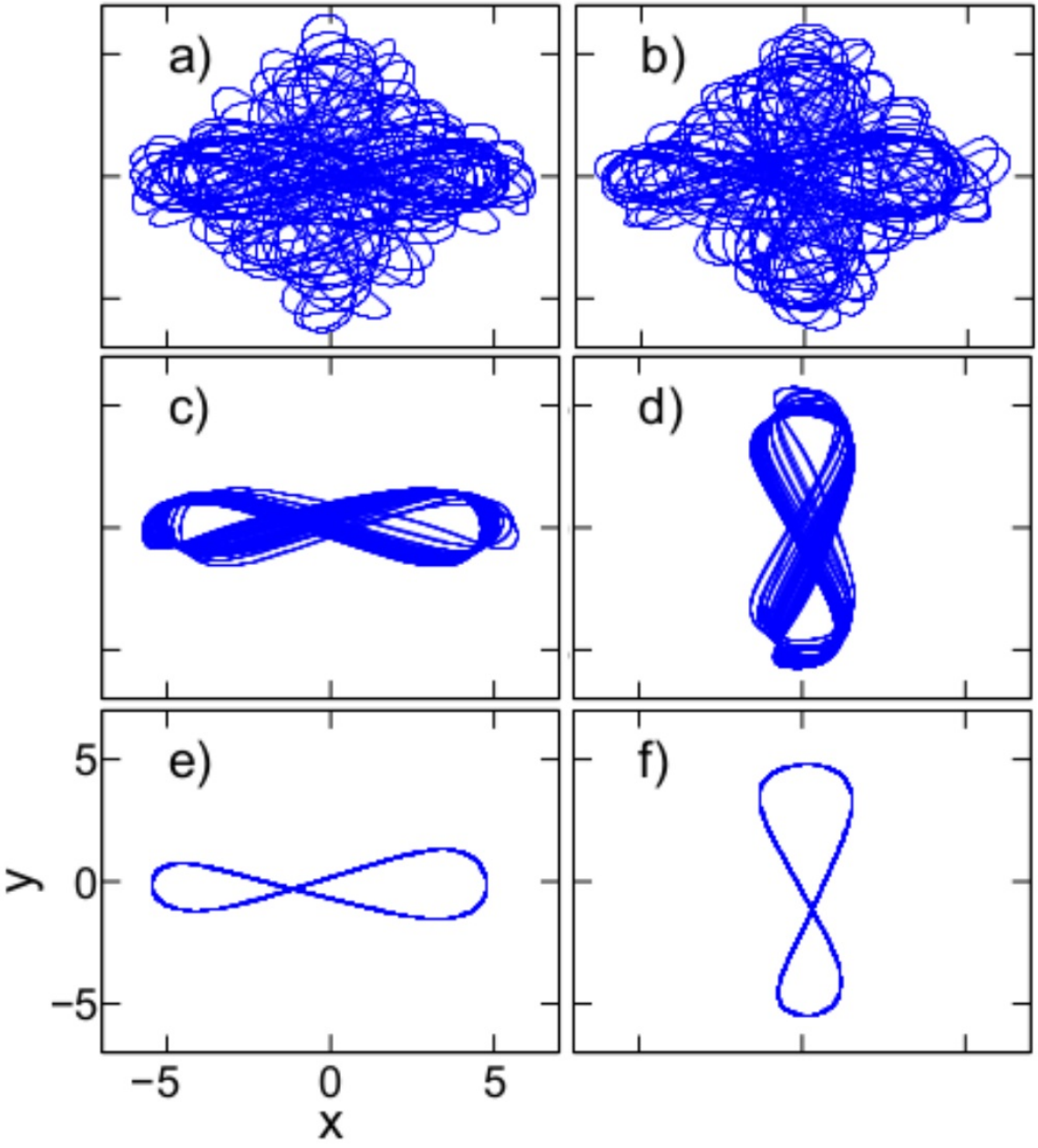


Figura 5.3: Algunas trayectorias de las GCs características del sistema GCs sometidas a una potencial cuártico (5.1) con $\alpha_2 = 1/100$ y $\alpha_1 = 1/20$ para dos condiciones iniciales diferentes (izquierda y derecha) y valores crecientes del tiempo característico: (a)-(b) $T_v = 0.2$, (c)-(d) $T_v = 0.4$ y (e)-(f) $T_v = 0.5$.

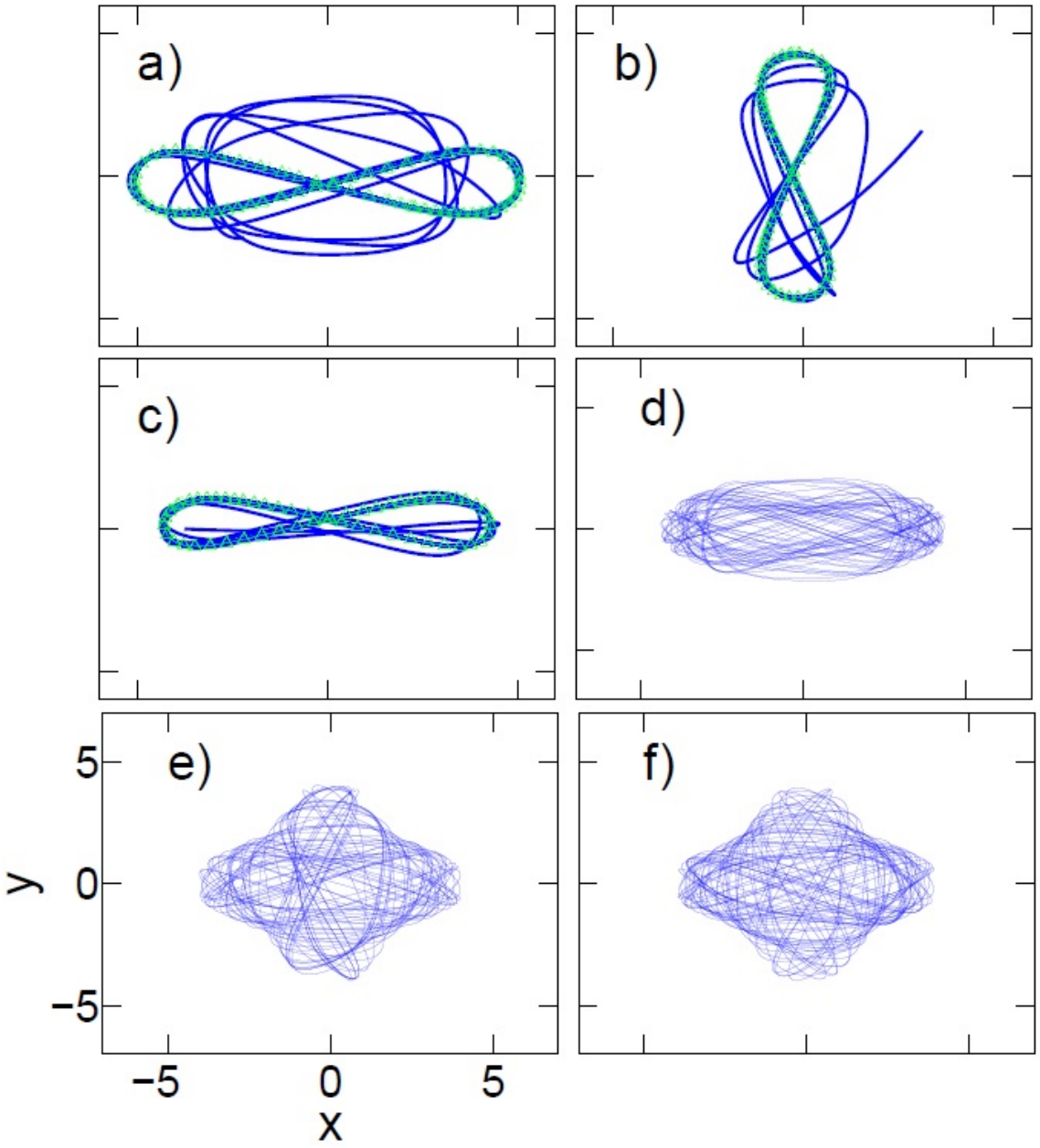


Figura 5.4: Igual que la figura 5.3 para una única condición inicial y diferentes valores del parámetro de memoria: (a) $T_v = 0.7$, (b) $T_v = 0.9$, (c) $T_v = 1.0$, (d) $T_v = 1.1$, (b) $T_v = 1.8$ y (c) $T_v = 2.1$. En esta figura se ha representado el régimen transitorio de la trayectoria en azul, y el final del atractor de la dinámica en verde.

respecto del término de fricción.

A continuación seguimos nuestra exploración previa considerando trayectorias de GCs representativas correspondientes a los valores más altos del parámetro T_v (menor fricción); los resultados correspondientes se muestran en la figura 5.5. Como se puede ver, las mismas conclusiones anteriores son aquí igualmente válidas, y, además, aparece un movimiento periódico nuevo más complejo, que debe corresponder a otro atractor diferente del anterior. En este caso, la forma de la órbita en el espacio de configuraciones se asemeja a una pajarita o ∞, en la parte central y a una parábola en la parte externa. Es interesante observar aquí, que esta forma también se encuentra en una OP en el oscilador cuártico hamiltoniano [115].

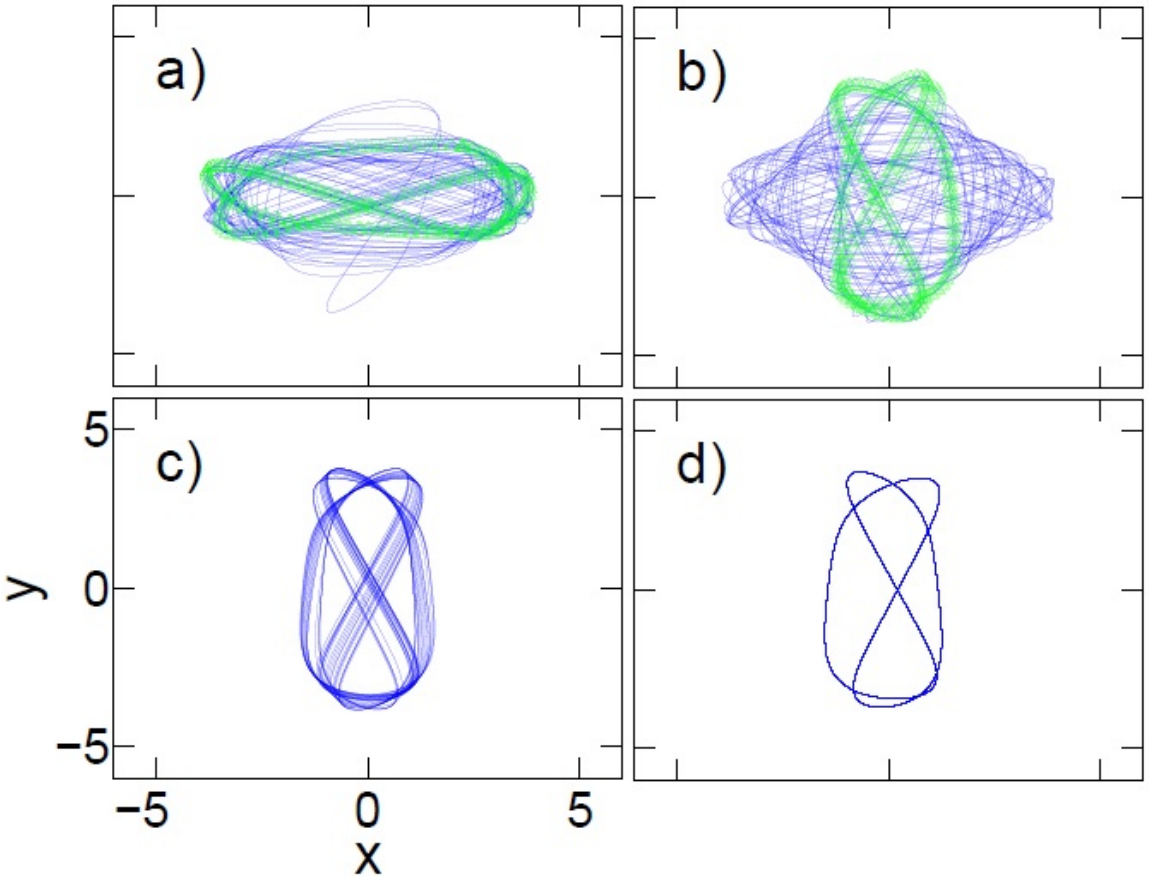


Figura 5.5: Igual que la figura 5.4 para: (a) $T_v = 2.3$, (b) $T_v = 2.4$, (c) $T_v = 2.5$ y (d) $T_v = 2.7$.

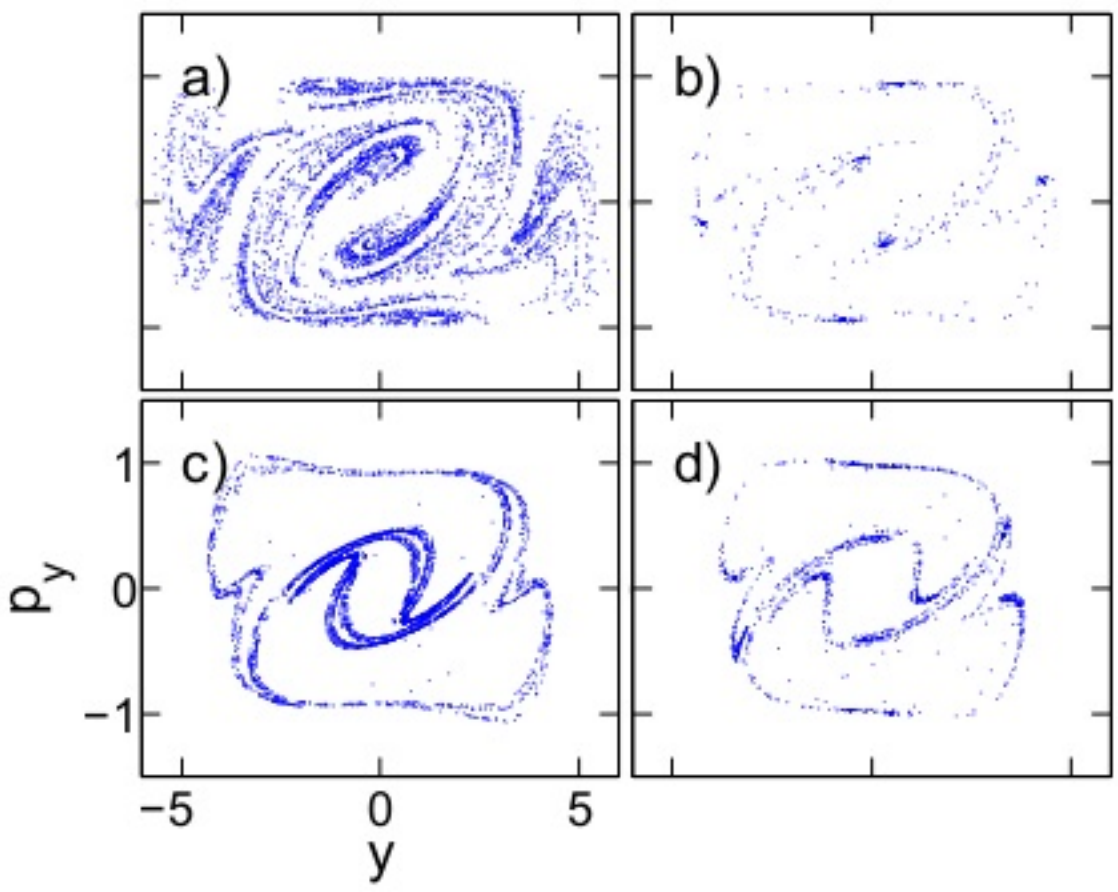


Figura 5.6: Superficie de sección de Poincaré compuestas para GCs con diferentes valores del parámetro de memoria: (a) $T_v = 0.2$, (b) $T_v = 0.9$, (c) $T_v = 1.1$ y (d) $T_v = 2.7$. Cada figura es el resultado de 50 trayectorias generadas propagando las condiciones iniciales aletorias hasta que cortan 200 veces la superficie de sección. Ver el texto para más detalles.

5.2.2 Superficie de sección de Poincaré

Para completar la discusión de las figuras 5.3-5.5, vamos a explorar ahora la correspondiente SSP compuesta, como se definió en la subsección 2.5.

Algunos resultados representativos se muestran en la figura 5.6 para valores bajos del parámetro de fricción, correspondientes a $T_v = 0.2 - 2.7$. Estas gráficas fueron obtenidas con resultados de 50 trayectorias comenzando con condiciones iniciales aleatorias que cubren uniformemente el espacio de fases disponible, propagando cada una hasta que cruza 200 veces la SSP. Los diferentes paneles muestran el efecto

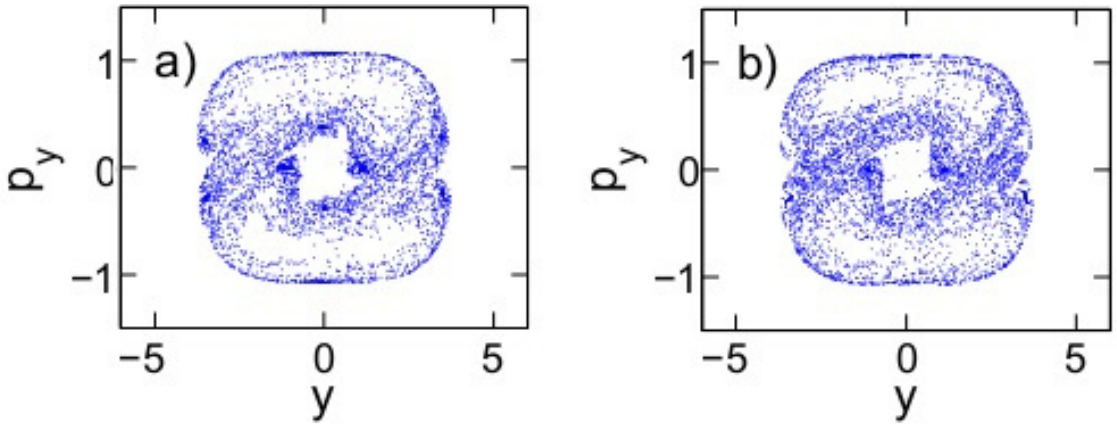


Figura 5.7: Igual que la figura 5.6 para (a) $T_v = 20$ y (b) $T_v = 25$.

dinámico del atractor, que atrae hacia sí las trayectorias que comienzan cerca del origen $(y_0, p_y) \simeq (0, 0)$, dejándo esta región vacía, y también en $(y_0, p_y) \simeq \pm(2.5, 0.5)$, dejando esas regiones también casi vacías de puntos. Como se observa en los diferentes paneles (a)-(d), el efecto es más pronunciado a medida que aumenta T_v. Cuando se examinan las SSP en detalle, vemos que para $T_v = 0.2$ [panel (a)] el efecto del atractor es pequeño, estando la mayoría de los puntos dispersos por todo el espacio de fases disponible, de forma que la dinámica se mantiene en el régimen transitorio. Sin embargo, cuando ha pasado el tiempo suficiente y el atractor ha conseguido atraer a todas las trayectorias, finalmente se concentran alrededor de seis puntos ubicados aproximadamente en $(y, p_y) = \pm(4.1, 0.09)$, $\pm(0.5, 0.99)$ y $\pm(0.3, 1.2)$, respectivamente. Para $T_v = 0.9$ [panel (b)] se observa claramente que el efecto del atractor es mucho más pronunciado, dado que la parte transitoria de la trayectoria es mucho más reducida, de forma que la concentración en los puntos finales que hemos indicado anteriormente queda claramente definida. A medida que T_v aumenta a un valor de 1.1 [panel (c)], el atractor evoluciona a una trayectoria cuasiperiódica, que emerge después del estado transitorio, y que tiene una forma clara de *remolino* en la parte central del SSP. Finalmente, se ve que esta estructura comienza a desintegrarse lentamente para valores del parámetro superiores, como $T_v = 2.7$ [panel(d)].

Para concluir esta parte de la discusión, presentamos en la figura 5.7 resultados

similares, pero para valores mucho mayores de T_v. Como se puede ver aquí, el efecto de la fricción es mucho menor, y comenzamos a recuperar los resultados de la trayectoria sin fricción, es decir, el sistema en ausencia de los efectos que provoca la GC en la dinámica lo podemos ver en la figura 5.2 [paneles (a) y (c)], y que corresponden a una dinámica muy caótica.

5.2.3 Atractores

En esta sección exploramos la existencia de atractores en nuestro sistema de trayectorias de GCs. Para este propósito, propagamos un tiempo suficientemente grande una trayectoria deslocalizada para $T_v = 0.3$ y $v_0 = 0.4$, que posteriormente se *deconstruye* dividiéndola en diferentes intervalos de tiempo. Los resultados se muestran en la figura 5.8. Hemos optado por presentarlos como una proyección en el plano del espacio de fases (x, v_x). Como se puede ver en el panel (a), la trayectoria completa cubre densamente todo el área excepto una pequeña región cerca del origen. Sin embargo, cuando observamos la dinámica en diferentes intervalos de tiempo [paneles (b) - (d)] la trayectoria se ve temporalmente atrapada o localizada en diferentes regiones del espacio de fases, saltando sucesivamente entre ellas. Por ejemplo, en el panel (b) presentamos los resultados para el intervalo $t \in [430, 450]$ que consiste en una primera parte que oscila en la región interior cerca del origen (en verde), y una segunda parte que se mueve en la región exterior (en azul); esta segunda parte se muestra más claramente por separado en el panel (c). Finalmente, en el panel (d), mostramos cómo este comportamiento se repite durante más tiempo en la dinámica de nuestra trayectoria. Estos resultados indican claramente que existen dos regiones separadas dinámicamente en el correspondiente espacio de fases.

5.2.4 Función de densidad de probabilidad

Para concluir la sección, discutimos el cálculo de Funciones de Densidad de Probabilidad (*Probability Density Function*, PDF), similar al que realizaron Bush y colaboradores en la referencia [116], que dan como resultado distribuciones que

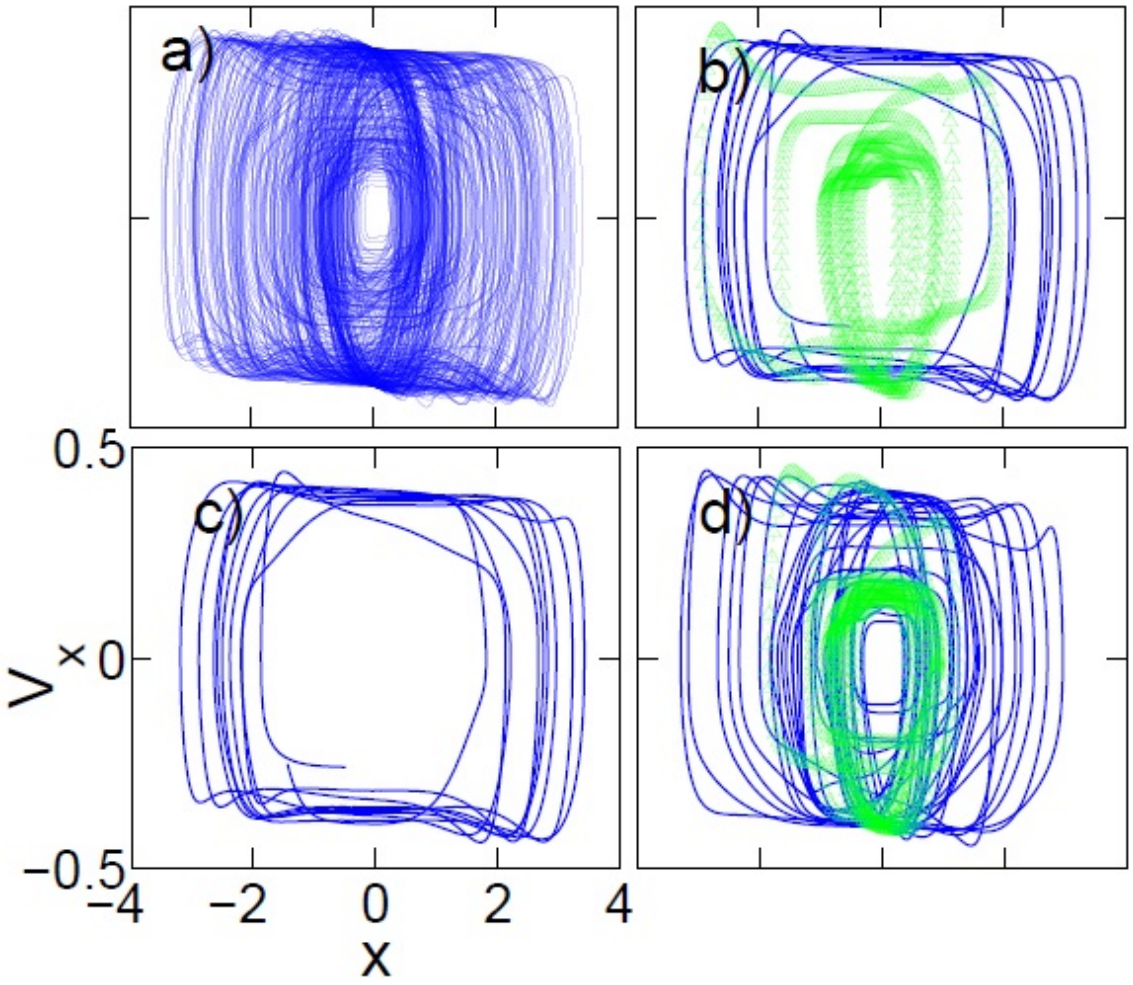


Figura 5.8: Estructura del atractor discutido en la sección 5.2.3 en el plano (x, v_x) para $T_v = 0.3$ y $v_0 = 0.4$ obtenida con la deconstrucción de una trayectoria representativa. Intervalos de tiempo: (a) trayectoria completa, (b) $t \in [430, 450]$ en verde y $t \in [450, 480]$ en azul, (c) $t \in [450, 480]$, (d) $t \in [560, 640]$ en azul y $t \in [640, 660]$ en verde.

se asemejan a la densidad de probabilidad de las funciones de onda cuánticas. El procedimiento es bastante sencillo. Simplemente consiste en dividir el espacio de configuraciones en multitud de pequeños cuadrados o *píxeles*, y contar las veces que pasa una trayectoria determinada a través de cada uno de ellos. El valor correspondiente de este conteo se representa entonces por un color diferente en el píxel asociado al cuadrado. De esta forma se obtiene un histograma, que representa la PDF asociada a la trayectoria, que puede ser adecuadamente representada como un mapa de colores.

Los resultados correspondientes a cuatro trayectorias no localizadas propagadas

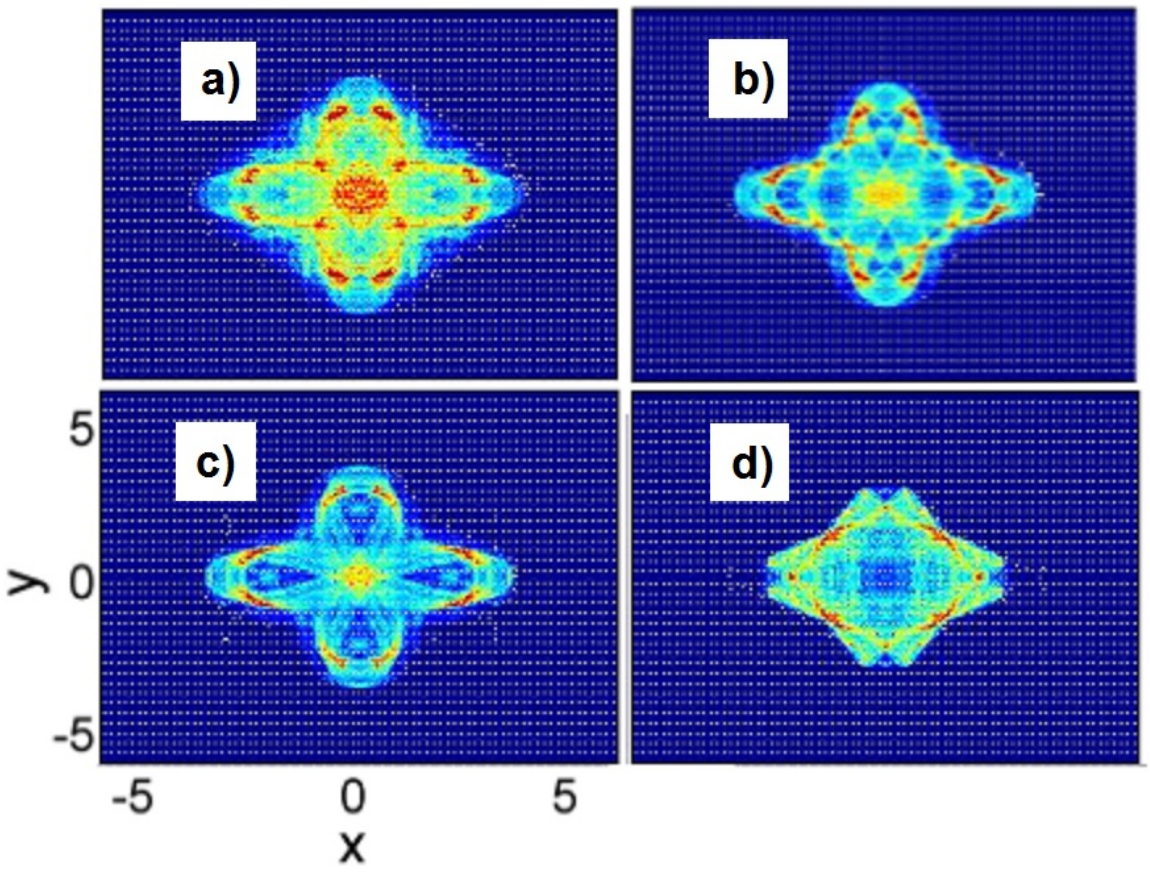


Figura 5.9: Función de densidad de probabilidad (PDF) para las trayectorias de las GCs definidas en la sección 5.2.4 para diferentes valores de T_v: (a) 0.28, (b) 0.52, (c) 0.56 y (d) 2.5, en escala de color. Los colores rojos corresponden a valores altos y los azul oscuro a valores bajos.